UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA E CIÊNCIA DOS MATERIAIS

*Dinâmica de Pacotes de Onda em Fios e
Poços Quânticos duplos Assimétricos e
Acoplados.*

JOSÉ EDUARDO MANZOLI

*Dissertação apresentada ao Instituto de Física
e Química de São Carlos, Universidade de São
Paulo, para a obtenção do título de Mestre em
Ciências Física Básica.*

Orientador: Prof. Dr. Oscar Hipólito

São Carlos - São Paulo
1993

Serviço de Biblioteca e Informação - IFQSC
FÍSICA

**IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO**
Instituto de Física e Química de São Carlos

Fone (0162) 72-6222
Fax (0162) 72-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE JOSE EDUARDO MANZOLI APRESENTADA À
INSTITUTO DE FÍSICA E QUÍMICA DE SÃO CARLOS, DA UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 24/09/1995

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
Caixa Postal 369
CEP 13560.970 - São Carlos - SP
Brasil

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Oscar Mizobuchi

Prof. Dra. Maria da Junqueira Caldas

Prof. Dr. Luiz Eduardo Moreira Carvalhade Oliveira

Ao pai, à mãe
e à F8

AGRADECIMENTOS

Agradeço:

Ao Doutor Oscar Hipólito, comigo desde a Iniciação Científica, me motivou e orientou todo esse tempo.

Ao Doutor Marcos Henrique Degani, pela paciência e auxílio durante toda essa pós.

Ao Dr. Fabio Beltran pelas referências indicadas.

Aos colegas e amigos do IFQSC, pela colaboração e gostoso convívio.

Ao CNPq pelo suporte financeiro.

Especialmente para Andrea (Fô), esposa dedicada e pessoa de onde retiro mais forças para continuar pesquisando.

índice

resumo.....	1
abstract.....	11
capítulo I - INTRODUÇÃO.....	01
capítulo II - método utilizado: SPLIT-OPERATOR.....	09
II-1 Algoritmo em tempo real.....	09
II-2 Algoritmo em tempo imaginário.....	14
II-3 Observações.....	18
capítulo III - APLICAÇÕES.....	19
III-1 POÇO DUPLO ASSIMÉTRICO (ADQW).....	20
III-1-1 Resultados na Banda de Condução.....	22
III-1-1-1 em Tempo Imaginário.....	22
III-1-1-2 em Tempo Real.....	27
III-1-2 Resultados na Banda de Valência.....	37
III-1-3 ADQW - Conclusões.....	40
III-2 FIO DUPLO ASSIMÉTRICO (ADQW1).....	44
III-2-1 Resultados na Banda de Condução.....	45
III-2-1-1 em Tempo Imaginário.....	45
III-2-1-2 em Tempo Real.....	49
III-2-2 Resultados na Banda de Valência.....	56
III-2-3 ADQW1 - Conclusões.....	59
capítulo IV - CONCLUSÃO.....	61
APÊNDICE I - dedução de Glauber.....	64
APÊNDICE II - unidades.....	64
APÊNDICE III - split de energia.....	65
APÊNDICE IV - evolução temporal do pacote.....	66
APÊNDICE V - programas (disquete anexo).....	67
APÊNDICE VI - Testes.....	67
APÊNDICE VII - algoritmo de Tomas.....	76
APÊNDICE VIII - discretização não-uniforme.....	77
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	78

Resumo

Nós calculamos numericamente a variação dos auto-estados e das auto-energias (sub-bandas) de portadores de carga em heteroestruturas semicondutoras do tipo de poços e fios quânticos duplos assimétricos e acoplados, em função do campo elétrico.

Pacotes de onda como soma de auto-estados são formados e estudados em suas evoluções. A variação de valores esperados no tempo foi observada. Em particular estudamos o pacote soma dos dois primeiros autoestados da banda de condução, quando ressonantes pela aplicação de um determinado campo elétrico.

Tais estudos, nessas heteroestruturas cujas dimensões são muito reduzidas, mostraram tempos de tunelamento eletrônico da ordem de pico ou femtosegundos, atraentes para a fabricação de dispositivos opto-eletrônicos ultra-rápidos, e seu entendimento é inerentemente quântico.

O método numérico que utilizamos, inicialmente aplicado à Dinâmica Molecular, mostra-se muito útil nesses sistemas semicondutores da Física do Estado Sólido.

Abstract

We calculate, through a numerical method, the variation of the electron and hole eigen-states and eigen-energies (sub-bands) in double asymmetric coupled quantum wells or wires semiconductor heterostructures as function of electric field.

We formed sum of eigen-states wavepackets and studied their evolution. The variation of mean values was observed. In particular, we studied the packet formed by the addition of the first and the second conduction sub-bands, when both are in resonance caused by a determinate electric field.

These studies are developed in heterostructures whose dimensions are very small, showing tunneling times in the order of pico or femtoseconds, which are attractive to opto-electronics ultra-fast devices fabrication. These phenomena belong to quantum mechanical field.

The numerical method that we used, applied to Molecular Dynamics, was proved to be very efficient in this solid state situation.

"At any rate, it seems that the laws of physics present no barrier to reducing the size of computers until bits are the size of atoms, and quantum behavior holds dominant sway."

Richard P. Feynman^{*}

CAPÍTULO - I

Introdução

Há poucas décadas, apenas em áreas da Física de baixas-temperaturas existia oportunidade de estudar e adquirir experiência com efeitos macroscópicos da Mecânica Quântica. Infelizmente o número de sistemas com essas características era pequeno e muitas vezes limitado a estados sólido ou líquido do Hélio ou poucos tipos de supercondutores. Estes sistemas também incorporavam efeitos complexos de muitos-corpos que tornam difícil o controle e conhecimento dos seus princípios básicos.

Hoje a fabricação estrutural em Estado Sólido permite a manifestação de efeitos quânticos macroscópicos^[01]. Pode-se observar e controlar efeitos quânticos em larga escala em diversos materiais e estados da matéria condensada.

Com o advento das técnicas de crescimento epitaxial de filmes ultra-finos, inaugurou-se a era da Física de baixa dimensionalidade e tornou-se claro que interfaces de heteroestruturas semicondutoras com grande descontinuidade de bandas de energia^[02] são reais. Uma técnica típica de crescimento epitaxial é o MBE^[03] (Molecular Beam Epitaxy). A extrema pureza, controle e precisão na deposição de camada por camada (de espessura praticamente atômica)

* de "Quantum Mechanical Computers", Optics News, pp.11-20, Fevereiro de 1985, publicado pela Optical Society of America.

dos compostos que irão formar o semicondutor a torna a principal forma de crescimento de heteroestruturas com uma descontinuidade abrupta na interface entre 2 tipos diferentes de semicondutores. A diferença de bandas de energia surge de diferentes composições química ou física dos semicondutores; na interface tal diferença gera degraus ao potencial experimentado pelo elétron na direção perpendicular ao plano de crescimento epitaxial.

Há estruturas tipicamente bi-dimensionais, onde os efeitos quânticos surgem do confinamento na direção epitaxial (poços quânticos ou planos quânticos - quantum wells^[4] - QW). Estes são heteroestruturas onde se cresce um semicondutor A, a seguir outro semicondutor B, com gap de energia^[02] menor que A, e logo após novamente A. A espessura de B sendo da ordem de ou menor que o comprimento de onda de Broglie do elétron causa efeitos inerentemente quânticos ao comportamento deste na direção de crescimento; daí o nome quântico. Essas heteroestruturas podem ser do tipo I, ou seja, os elétrons de valência e os de condução experimentam poços nos mesmos locais; ou do tipo II, onde os elétrons de condução experimentam poços enquanto os de valência sentem barreiras nos mesmos locais (referência [04], página 86). Dentro da camada de crescimento B o elétron e o buraco, se a estrutura for do tipo I, comportam-se como livres nas direções paralelas ao plano, daí ser uma estrutura quase-2D (quase pois B ainda tem uma certa espessura).

A possibilidade de variar composição, diferença de bandas, periodicidade, etc, permite uma vasta variedade de estruturas para exploração física, bem como aplicações em dispositivos elétricos ou óticos.

Recentes avanços na tecnologia de microfabricação^[6,7] permitiram que um confinamento em dimensões laterais fosse criado, surgindo os fios quânticos (quantum wires^[5] - QWi) que são um "retalhamento" do plano quântico em "tiras" através de ataque químico, bombardeamento iônico ou por radiação X. Em termos simples: cresce-se A, em seguida B, cobre-se B com uma máscara que deixa protegido regiões de B na forma de fios. Corroe-se as regiões desprotegidas de B e se cresce novamente A, que irá depositar-se não

só sobre B mas nas regiões corroídas, deixando B na forma de um fio envolto pelo material A (estrutura quase-1D).

Também surgiram: guias de onda, pontos (dots) e caixas quânticas (uma extensão do método de crescimento usado para os fios, onde a máscara cobre apenas pontos), super-redes (arranjo periódico de poços, fios ou dots onde o tamanho do período permite interação entre os elementos), dispositivos de interferência quântica, átomos artificiais (dots especiais), etc.

É grande a pesquisa nesse domínio microscópico com aplicações em nanodispositivos não-lineares, de interferência eletrônica, ultra-rápidos.

Na microeletrônica, distâncias pequenas e velocidades altas estão intimamente relacionadas, como em transistores com comprimentos de Base de poucos décimos de nanômetros, que têm tempos de trânsito eletrônico que podem ser menores que um picosegundo. Assim, para fazer algo rápido, geralmente deve-se fazê-lo pequeno.

Com os lasers de femtosegundos, novas técnicas óticas de análise e o uso de supercomputadores propicia-se uma alta resolução espacial e temporal na investigação e modelamento de nanodispositivos.

Técnicas óticas de resolução temporal tem sido intensivamente usadas no estudo da dinâmica de portadores de carga em heteroestruturas semicondutoras. A simulação dessa dinâmica numericamente aproxima o sistema real da previsão teórica e é especialmente útil quando métodos analíticos não são aplicáveis ou o experimento é por demais oneroso.

Os portadores são descritos pelos seus pacotes de onda cuja evolução temporal (chave de sua dinâmica) é determinada pelos fatores de fase dos auto-estados que os compõem. Sua dinâmica é puramente coerente se processos de espalhamento, como emissão de fônons ou espalhamento portador-portador, não atuarem.

Poços quânticos duplos (DQW) acoplados são provavelmente os sistemas mais simples para observação da dinâmica de pacotes de onda. Tais sistemas são importantes em muitas áreas da Física, como na molécula de Amônia, movimento de defeitos em sólidos, certas reações químicas, etc.

A primeira observação experimental da dinâmica espacial de pacotes de onda em sólidos foi a oscilação de pacotes de onda como soma dos dois primeiros autoestados em poços quânticos semicondutores duplos assimétricos acoplados^[8] (asymmetric double quantum wells - ADQW) na ressonância do 1.^o com o 2.^o nível eletrônico¹. Neles, a aplicação de um campo elétrico fraco, no sentido do poço estreito para o poço largo eleva os níveis do poço largo até a ressonância (fig.I-1a).

fig.I-1:a)diagrama de banda esquemático dos ADQW. Transições interbandas ocorrem a energias fotônicas menores no WW (ν_1) que no NW (ν_2), assim, um pulso de laser curto, com dispersão espectral ($\Delta\nu$) tal que $\Delta\nu > (E_- - E_+)/h$ excita o pacote apenas no WW. Um momento de dipólo elétrico oscila com o pacote pois os buracos não acompanham o elétron. Em b) o aparato experimental esquematizado para captar a radiação dessa oscilação.

¹ na extensão dessas oscilações para 3, 4,... poços acoplados (que formam minibandas), as oscilações dos pacotes passam a se chamar Oscilações de Bloch^[9].

Naquele trabalho de 1992 observou-se^[8] radiação eletromagnética de comprimento de onda menor que um milímetro, emitida pela oscilação coerente do elétron, entre os poços de um ADQW usando detecção coerente de resolução temporal. Catorze oscilações foram observadas antes que a relaxação destruísse a coerência².

O sistema utilizado experimentalmente era composto de poços de GaAs com 145Å e 100Å separados por 25Å de $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$. Cada ADQW é separado de outros por 200Å de $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$. Dez desses pares são "sandwichados" entre camadas de 3500Å de $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ ³. Há dez desses poços duplos pois medidas de absorção ótica teriam um sinal muito fraco de uma única dupla. A concentração baixa de Alumínio (20%) foi usada pois por volta de 35% o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ torna-se de gap indireto (no caso o ponto L na rede recíproca apresentará a BC mais baixa que no ponto Γ) e os efeitos tornariam a análise mais complexa pela necessária inclusão dos fônons no Hamiltoniano. A estrutura é necessariamente do tipo I para garantir o confinamento de elétrons e buracos nas mesmas regiões.

A assimetria é uma característica peculiar que faz com que a transição da banda de valência (BV), tanto de buracos leves (light hole - LH) quanto de buracos pesados (heavy hole - HH), para a banda de condução (BC) no poço largo (wide well - WW) seja bem diferente da transição no poço estreito (narrow well - NW) para um mesmo nível na BC, em particular na ressonância do 1º com o 2º nível da BC na presença de campo elétrico. Em outras palavras, os LHs e os HHs ficam localizados enquanto o elétron se delocaliza, na ressonância, entre os 2 poços. Assim é possível "colocar" o elétron (vindo da BV) num dos dois poços apenas, dependendo da energia fotônica usada, pois este fóton é diferente para buracos localizados em poços diferentes.

² Aquele trabalho também mostra uma evidência que sugere a 1ª observação da contribuição não ressonante induzida pelo campo ao sinal de retificação ótica.

³ essas dimensões são obtidas a partir de medidas óticas. Entretanto o crescimento indicou valores maiores, daí o aparecimento de uma certa incerteza.

Nesse sistema publicado, a ressonância ocorre a 10,5 KV/cm no WW e o período de oscilação medido é 800 fs a 10,4 KV/cm. No NW o campo necessário à ressonância é menor. Essa diferença é explicada quando incluem-se efeitos de éxcitons na teoria (fig.I-2,3a). Sem tais efeitos espera-se que o campo de ressonância seja próximo a estes 10,5KV/cm pois no NW a densidade de probabilidade dos HHs é mais localizada, há uma energia de ligação maior e portanto o campo necessário à ressonância é menor.

fig.I-2:mudança no split de energia com a inclusão de éxcitons (linha cheia). Além de deslocar o campo necessário à RESS. (diferentemente no WW e no NW),eles aumentam o ΔE . Sem éxciton $\Rightarrow$ linha pontilhada.

fig.I-3:(a) energias fotônicas teóricas necessárias às transições da BV para a BC sem (linhas pontilhadas) e com (linhas cheias) efeitos de éxcitons; (b) espectro de fotocorrente da amostra.

O elétron foi colocado na BC, na forma do pacote de onda desejado, por um laser de pulsos de duração ~ 160 fs (menor que meio período de oscilação), 1.54 meV, 7nm de meia-dispersão no comprimento-de-onda, a temperatura de 10K e densidade de portadores nos poços abaixo de $5 \cdot 10^9 \text{cm}^{-2}$, para diminuir a relaxação de fase. E assim posto, sua densidade de probabilidade eletrônica oscila entre os

poços (apêndice IV) emitindo radiação eletromagnética de um dipólo elétrico, pois o buraco não acompanha a oscilação eletrônica, podendo ser captada por uma antena especial (capacidade de resolução de sinais com frequências da ordem de TeraHertz). O ideal é que o intervalo de variação da energia dos fótons do laser seja maior que a separação de energia ("split") na ressonância, para assegurar que o pacote tenha os dois autoestados como componentes, e menor que $h(\nu_1 - \nu_2)$, para assegurar a localização do pacote em apenas um dos poços, (fig.I-1a).

Dispositivos com heteroestruturas semelhantes a esta, onde o comportamento é inerentemente quântico e a perfeita compreensão da dinâmica do pacote de onda eletrônico é indispensável, podem ter utilíssimas aplicações tecnológicas. Como exemplo direto, pode-se criar um novo método de emissão de ondas eletromagnéticas menores que um milímetro (frequências da ordem de TeraHertz)⁽¹⁰⁾.

Nosso trabalho simulou numericamente o comportamento eletrônico e dos buracos no ADQW citado⁽⁸⁾, comparando os resultados. Isto consta no capítulo III-1.

Dada a boa concordância dos nossos resultados com a referência [8], aplicamos o mesmo estudo ao caso de fios quânticos duplos acoplados e assimétricos (ADQWi) no capítulo III-2, demonstrando a aplicabilidade do método numérico usado a sistemas mais complexos e de necessária resolução espacial em duas dimensões.

O algoritmo do método numérico utilizado é apresentado no capítulo II. Tal processo foi desenvolvido para Dinâmica Molecular, mas se mostra bastante útil na Física do Estado Sólido⁽¹¹⁾.

Usando tal algoritmo, compilei os programas em FORTRAN-77, exemplo dos quais estão no disquete anexo. Testes desses programas constam no apêndice-VI. Lá, entre outras coisas, mostro densidades de probabilidades de autoestados de poços infinitos uni e bi-dimensionais. Podemos, portanto, utilizar didaticamente o algoritmo descrito também para problemas de Mecânica Quântica elementar.

Em nossos próximos trabalhos, pretendemos estudar sistemas mais complexos em duas dimensões, provavelmente super-redes de fios quânticos sob a ação de campos magnéticos ou efeitos de dopagem, com possível aplicação em dispositivos opto-eletrônicos.

Neste capítulo mostramos os cálculos que atestam as modificações que sofre a função de onda de uma partícula, dada a função num instante anterior. Tal evolução é calculada numericamente. Para isso "quebra-se" a função, antes contínua, em um número finito de pontos (discretização) tanto espacial quanto temporalmente. A discretização é escolhida de forma a que uma variação no número de pontos em que a função será quebrada não influencie a função evoluída ou os resultados obtidos, e que o tamanho da discretização seja bem menor que extensões espaciais ou temporais dos fenômenos físicos em estudo.

Quando a evolução é feita obedecendo a equação de Schrödinger (02), chamamos de evolução em tempo real, pois é o que realmente ocorre com a função de onda. Quando em (02) troca-se o $(i\hbar)$ por $(-\hbar)$ do lado direito, esta equação torna-se análoga a de Difusão de Calor (guardados os devidos coeficientes), e uma função inicial, quando a ela submetida, evolui no que chamamos de tempo imaginário.

II - 1

Algoritmo em tempo real

Desprezando termos dissipativos, efeitos excitônicos, fônons, etc as heteroestruturas aqui estudadas podem ser aproximadas por um sistema ideal simples, com Hamiltoniano

$$H = \frac{P^2}{2m} + V = \frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r}) \quad (01)$$

onde $V(\vec{r})$ é o potencial que a partícula de massa m (elétron ou buraco) enfrenta.

Mesmo simples, este Hamiltoniano encerra muita Física aplicável a importantes dispositivos optoeletrônicos futuros.

A massa m será assumida como a massa específica do portador dependente do material a que pertença, variando com a posição ($m^* = m(\vec{r})$). Junto com $V(\vec{r})$, $m(\vec{r})$ faz com que o Hamiltoniano (01) apresente as propriedades da rede cristalina sólida a que a partícula está sujeita, necessárias ao nosso estudo.

Num sistema físico, a função de onda da partícula m obedece a eq. Schrödinger:

$$H \psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (02)$$

com uma condição inicial $\psi(\vec{r}, 0)$
e condição de contorno $\psi(\vec{r}_i, t)$.

A equação (2) "dita" o comportamento da função de onda a qualquer tempo, o que é melhor visualizado pela seguinte operação:

Aplicando aos dois lados de (2) $\left[\frac{\partial}{\partial t} \right]$ e integrando $\rightarrow$

$$\frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} H dt = \int_{\psi(t)}^{\psi(t+\Delta t)} \frac{1}{\psi} d\psi = \ln[\psi(t+\Delta t)] - \ln[\psi(t)]$$

$$\rightarrow e^{\frac{1}{i\hbar} \int_t^{t+\Delta t} H dt} = \frac{\psi(t+\Delta t)}{\psi(t)}$$

Se H não variar no tempo, como ocorre nessa Dissertação, ou se variar suavemente, a integral no expoente anterior é direta, resultando:

$$\begin{aligned} \psi(t+\Delta t) &= e^{\frac{H\Delta t}{i\hbar}} \psi(t) = e^{\frac{1}{i\hbar} \left[\frac{p^2}{2m} + V \right] \Delta t} \psi(t) = \\ &= e^{\frac{1}{i\hbar} \left[\frac{V}{2} + \frac{p^2}{2m} + \frac{V}{2} \right] \Delta t} \psi(t) = \end{aligned}$$

$$= \psi(t+\Delta t) = e^{\frac{\Delta t}{i\hbar 2} V + \frac{\Delta t}{i\hbar 2} \left[\frac{P^2}{m} + V \right]} \psi(t) \quad (03)$$

Assim, tendo a função num tempo (t), a função num tempo (t+Δt) será aquela em (t) onde se aplica o operador exponencial anterior (3). A dinâmica da função "é" a equação (3).

Até aqui já se fez a discretização temporal pois o tempo contínuo foi "quebrado" em Δts. O operador exponencial em (3) não é diretamente aplicável, na base espacial, devendo ser modificado. Fez-se tal modificação da seguinte maneira:

Pela dedução de Glauber (apêndice I), onde

$$B = \frac{\Delta t}{i\hbar 2} \left[\frac{P^2}{m} + V \right] \quad e \quad A = \frac{\Delta t}{i\hbar 2} V$$

pode-se "splitar" (daí o nome do procedimento) ou separar o operador exponencial anterior em:

$$e^{\frac{\Delta t}{i\hbar 2} V + \frac{\Delta t}{i\hbar 2} \left[\frac{P^2}{m} + V \right]} = e^{\frac{\Delta t}{i\hbar 2} V} e^{\frac{\Delta t}{i\hbar 2} \left[\frac{P^2}{m} + V \right]} e^{\frac{(\Delta t)^2}{8\hbar^2 m} [P^2, V]}$$

e usando a mesma dedução para o segundo fator onde

$$B = \frac{\Delta t}{i\hbar 2} V \quad e \quad A = \frac{\Delta t}{i\hbar 2 m} P^2$$

$$e^{\frac{\Delta t}{i\hbar 2} \left[\frac{P^2}{m} + V \right]} = e^{\frac{\Delta t}{i\hbar 2} \frac{P^2}{m}} e^{\frac{\Delta t}{i\hbar 2} V} e^{\frac{-(\Delta t)^2}{8\hbar^2 m} [P^2, V]}$$

assim

$$e^{\frac{1}{i\hbar} \left[\frac{V}{2} + \frac{P^2}{2m} + \frac{V}{2} \right] \Delta t} \psi(t) = e^{\frac{\Delta t}{i\hbar 2} V} e^{\frac{\Delta t}{i\hbar 2} \frac{P^2}{m}} e^{\frac{\Delta t}{i\hbar 2} V} \psi(t) = \psi(t+\Delta t) \quad (04)$$

Esse split do operador tornou correto até ordem 3 em Δt a resolução de Schrödinger. Note-se que a dedução de Glauber é válida desde que

$[A, [A, B]] = [B, [A, B]] = 0$; que no caso:

$$[A,B] = \frac{-(\Delta t)^2}{4\hbar} \left[v, \frac{p^2}{m} + v \right] \rightarrow \text{ordem 2 em } \Delta t$$

$$[B,[A,B]] = \frac{-(\Delta t)^3}{8\hbar^2 i} \left[\frac{p^2}{m} + v, \left[v, v + \frac{p^2}{m} \right] \right] \rightarrow \text{ordem 3 em } \Delta t$$

$$[A,[A,B]] = \frac{-(\Delta t)^3}{8\hbar^2 i} \left[v, \left[v, v + \frac{p^2}{m} \right] \right] \rightarrow \text{ordem 3 em } \Delta t$$

Assim, "splitar" tal operador é correto desde que se faça a discretização no tempo tão pequena que $(\Delta t)^3$ seja um erro tolerável.

De (4), vê-se que precisamos primeiro aplicar $e^{\frac{\Delta t}{i\hbar} v}$ à $\psi(t)$ que é apenas multiplicar tal número pela função, gerando uma função produto $\zeta(\vec{r})$ tal que:

$$\zeta(\vec{r}) = e^{\frac{\Delta t}{i\hbar} v} \psi(t) \quad (05)$$

Feito isso, deve-se aplicar o operador $e^{\frac{\Delta t}{i\hbar} \frac{p^2}{m}}$ à $\zeta(\vec{r})$. Poder-se-ia expandi-lo até uma certa ordem, aplicando-se cada uma das parcelas. Mas essa expansão finita não seria um operador unitário, o que tornaria necessária uma normalização da função após cada operação. Para evitar essa normalização constante encontrou-se outro operador, unitário, que tenha a mesma expansão que este até a maior ordem possível, qual seja:

$$\begin{aligned} \frac{1 + \frac{k}{2}}{1 - \frac{k}{2}} &= \left[1 + \frac{k}{2} \right] \left[1 + (-1) \left(\frac{-k}{2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{(-1)(-2)}{2!} \left(\frac{-k}{2} \right)^2 + \frac{(-1)(-2)(-3)}{3!} \left(\frac{-k}{2} \right)^3 + \dots \right] = \\ &= 1 + k + \frac{k^2}{2} + \frac{k^3}{4} + \dots \end{aligned} \quad (06)$$

$$\text{obs.: } e^k = 1 + k + \frac{k^2}{2!} + \frac{k^3}{3!} + \dots \quad (07)$$

Portanto tal operador (6) é aplicável até a segunda ordem em k (que no caso é proporcional a $(\Delta t)^2$).

Aplicando o novo operador à ξ obtém-se uma nova função $\eta(\vec{r})$.

$$\eta(\vec{r}) = \frac{1 + \frac{P^2 \Delta t}{i4\hbar}}{1 - \frac{P^2 \Delta t}{i4\hbar}} \xi(\vec{r})$$

ou
$$\left[1 - \frac{P^2 \Delta t}{i4\hbar} \right] \eta(\vec{r}) = \left[1 + \frac{P^2 \Delta t}{i4\hbar} \right] \xi(\vec{r}) \quad (08)$$

A seguir faz-se a discretização espacial, ou seja, escreve-se as derivadas (projeções do momento ou potências deste na base espacial) em termos de diferenças finitas para que se possa resolver numericamente (8).

Para sistemas cuja resolução necessite uma geometria com apenas uma dimensão¹ (estruturas semicondutoras 2D):

$$\begin{aligned} P\psi(x) &= \hbar/i \frac{\psi(x+\Delta x) - \psi(x)}{\Delta x} \quad \text{ou} \quad \hbar/i \frac{\psi(x) - \psi(x-\Delta x)}{\Delta x} \\ P^2\psi(x) &= \frac{\hbar}{i\Delta x} \left[P\psi(x+\Delta x) - P\psi(x) \right] = \\ &= \frac{\hbar}{i\Delta x} \left[\hbar/i \frac{\psi(x+\Delta x) - \psi(x)}{\Delta x} - \hbar/i \frac{\psi(x) - \psi(x-\Delta x)}{\Delta x} \right] = \\ &= \frac{-\hbar^2}{(\Delta x)^2} \left[\psi(x+\Delta x) - 2\psi(x) + \psi(x-\Delta x) \right] \end{aligned}$$

Assim escrito, (08) se torna:

$$\eta(x) - \frac{\Delta t}{i4\hbar} \frac{-\hbar^2}{(\Delta x)^2} \left[\eta(x+\Delta x) - 2\eta(x) + \eta(x-\Delta x) \right] = v(x) \quad (09)$$

onde $v(x)$ é a aplicação de $\left[1 + \frac{P^2 \Delta t}{i4\hbar} \right]$ à $\xi(\vec{r})$.

sendo $\epsilon = \frac{i\hbar\Delta t}{4m(\Delta x)^2}$ o sistema (09) fica então:

¹>Ver apêndice VIII quando a discretização não é uniforme.

>Não se aplica uma Diferença Finita mais expandida pois não é necessária, além de acarretar maior tempo computacional.

$$\begin{bmatrix} 1+2\varepsilon & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ -\varepsilon & 1+2\varepsilon & -\varepsilon & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & -\varepsilon & 1+2\varepsilon & -\varepsilon & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & -\varepsilon & 1+2\varepsilon & -\varepsilon & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & 1+2\varepsilon \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \eta(0) \\ \eta(\Delta x) \\ \eta(2\Delta x) \\ \eta(3\Delta x) \\ \dots \\ \eta(D) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v(0) \\ v(\Delta x) \\ v(2\Delta x) \\ \dots \\ v(D) \end{bmatrix}$$

onde 0 e D são os extremos do domínio das funções em questão.

Para obter-se η deve-se resolver este sistema linear tridiagonal. Usamos no presente trabalho o algoritmo de Thomas, já otimizado, para tal solução (apêndice VII).

em 2 dimensões (estruturas semicondutoras 1D):

$$\psi(\vec{r}, t+\Delta t) = e^{-\frac{\Delta t}{i\hbar 2} V} \underbrace{e^{-\frac{i\hbar \Delta t}{2m} \frac{\partial}{\partial x^2}}}_{\eta_1} \underbrace{e^{-\frac{i\hbar \Delta t}{2m} \frac{\partial}{\partial y^2}}}_{\eta_2} \zeta(\vec{r}) \quad (10)$$

η_1 é encontrada pelo procedimento anterior, η_2 idem.

Tendo η , basta então multiplicá-lo por $e^{-\frac{\Delta t}{i\hbar 2} V}$ que se obtém $\psi(t+\Delta t)$ que é a função de onda num instante $t+\Delta t$ tendo-se tal função no instante t anterior ($\rightarrow$ evolução numérica).

II - 2 Algoritmo em tempo imaginário

Colocando-se uma função inicial cuja norma ao quadrado represente a distribuição de probabilidade do portador no início, determina-se sua evolução pelo procedimento da seção II-1.

Qualquer função ψ pode ser expressa como a combinação linear das funções de uma base completa, em especial da base das autofunções (φ_i) do Hamiltoniano, isto é:

$$\psi(\vec{r}, t) = \sum_n b_n \varphi_n(\vec{r}) = \sum_n \left[a_n e^{\frac{-iE_n t}{\hbar}} \right] \varphi_n(\vec{r}) \quad (11)$$

onde E_n é a autoenergia associada à φ_n
obs.: $E_i > E_j$ se $i > j$

Mudando-se a variável t por $(-i\tau)$ (chamamos de fazer a evolução em tempo imaginário) nas deduções anteriores (II-1), a equação de Schrödinger passa a ser a de Difusão de calor (cuja parte espacial é igual a de Schrödinger), o que implica que apresentará o mesmo conjunto de soluções particulares $\{\varphi_i\}$ como dependência espacial da solução. A parte temporal deixa de ser oscilatória para ser exponencial, o que deixa (11) como:

$$\sum_n \left[a_n e^{\frac{-E_n \tau}{\hbar}} \right] \varphi_n(\vec{r})$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{\quad}{\quad} =$$

$$\left[\sum_n \left[|a_n|^2 e^{\frac{-2E_n \tau}{\hbar}} \right] \right]^{1/2}$$

$$= \frac{a_0 e^{\frac{-E_0 \tau}{\hbar}} \varphi_0 + a_1 e^{\frac{-E_1 \tau}{\hbar}} \varphi_1 + \dots}{\left[|a_0|^2 e^{\frac{-2E_0 \tau}{\hbar}} + |a_1|^2 e^{\frac{-2E_1 \tau}{\hbar}} + \dots \right]^{1/2}} =$$

$$= \frac{a_0 e^{\frac{-E_0 \tau}{\hbar}} \varphi_0 + a_1 e^{\frac{-E_1 \tau}{\hbar}} \varphi_1 + \dots}{|a_0| e^{\frac{-E_0 \tau}{\hbar}} \left[1 + |a_1|^2 / |a_0|^2 e^{\frac{-2(E_1 - E_0) \tau}{\hbar}} + \dots \right]^{1/2}} =$$

$$\psi(\vec{r}, t) = \frac{a_0 / |a_0| \varphi_0 + a_1 / |a_0| e^{\frac{-(E_1 - E_0)\tau}{\hbar}} \varphi_1 + \dots}{\left(1 + |a_1|^2 / |a_0|^2 e^{\frac{-2(E_1 - E_0)\tau}{\hbar}} + \dots \right)^{1/2}}$$

obs.: o denominador é imposição da normalização à função.

Esta é a evolução da função, obedecendo a equação de difusão de calor, onde se impõe a normalização.

Grças a normalização, ao fazer a função evoluir um tempo imaginário muito grande, há o seguinte efeito:

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{a_0 / |a_0| \varphi_0 + a_1 / |a_0| e^{\frac{-(E_1 - E_0)\tau}{\hbar}} \varphi_1 + \dots}{\left(1 + |a_1|^2 / |a_0|^2 e^{\frac{-2(E_1 - E_0)\tau}{\hbar}} + \dots \right)^{1/2}} = \frac{a_0}{|a_0|} \varphi_0$$

Ou seja, $\psi \rightarrow \varphi_0$ (a função inicial convergiu para o autoestado de mais baixa energia, multiplicada por uma constante unitária complexa irrelevante).

Fazendo-se outra função qualquer ψ_1 evoluir um tempo infinito, esta também convergirá para φ_0 , mas se a obrigarmos a ser ortogonal à φ_0 , tem-se o seguinte efeito:

$$\langle \psi_1 | \varphi_0 \rangle = \langle a_0 e^{\frac{-E_0\tau}{\hbar}} \varphi_0 + a_1 e^{\frac{-E_1\tau}{\hbar}} \varphi_1 + \dots | \varphi_0 \rangle = a_0 e^{\frac{-E_0\tau}{\hbar}} \langle \varphi_0 | \varphi_0 \rangle =$$

$$= a_0 e^{\frac{-E_0\tau}{\hbar}} = 0 \quad \forall \tau$$

↑

imposição da ortogonalização

$$\rightarrow a_0 = 0$$

$$\rightarrow \psi_1 \rightarrow \psi_1^{\text{nova}} \text{ (sem a componente } \varphi_0 \text{)}$$

Portanto, elimina-se a componente φ_0 de ψ_1 , o que resulta, adicionando-se a este procedimento a normalização (limite anterior), em ψ_1 tender a φ_1 , ou seja, ψ_1 converge para o autoestado seguinte disponível.

Evoluindo uma terceira função, ortonormalizando-a com os 2 autoestados anteriores; ou uma quarta, ortonormalizando-a com os 3 autoestados anteriores, e assim por diante; processo conhecido como ortogonalização de Gram-Schmidt (Álgebra Linear):

$$\psi_0 \rightarrow \varphi_0 \quad \psi_1 \rightarrow \varphi_1 \quad \psi_2 \rightarrow \varphi_2 \quad \dots$$

Assim se obtém quantos autoestados se desejar, respeitando os limites computacionais disponíveis.

Colocamos funções iniciais quaisquer para evoluir em tempo imaginário obtendo autoestados dos respectivos potenciais enfrentados pelo elétron ou buraco numa heteroestrutura tipo dois poços ou fios de GaAs assimétricos e acoplados pela proximidade (fig.III-1 e 16). Os poços de GaAs são camadas que foram crescidas com uma camada fina de $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ separando-as e outras camadas muito espessas de $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ logo abaixo e acima do sistema. Esses potenciais são descritos nas seções seguintes, bem como os valores de massa específica, alguns detalhes da discretização espacial, etc. A autoenergia de um nível é obtida pela integral discreta $\int \psi^* H \psi \, d\vec{r}$ feita com o autoestado ψ ; esta é a sub-banda do portador.

As profundidades dos poços ou fios e as massas específicas são tomadas à temperatura de $10\text{K}^{(16,17)}$ para evitar espalhamento por fônons:

- 194,3 meV na BC (Banda de Condução)
- 86,5 meV na BV (Banda de Valência)

Sendo m_0 a massa de repouso do elétron, então a massa efetiva do elétron⁽¹⁶⁾ é:

$$\begin{aligned} m_{e,\Gamma}^* &= 0.0665 \, m_0 \text{ no GaAs} \\ m_{e,\Gamma}^* &= 0.0872 \, m_0 \text{ no } \text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As} \end{aligned}$$

A massa efetiva do LH é:

$$\begin{aligned} m_{LH,\Gamma}^* &= 0.0951 \, m_0 \text{ no GaAs}^{(16)} \\ m_{LH,\Gamma}^* &= 0.0996 \, m_0 \text{ no } \text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}^{(17)} \end{aligned}$$

A massa efetiva do HH⁽¹⁷⁾ é:

$$\begin{aligned} m_{HH,\Gamma}^* &= 0.62 \, m_0 \text{ no GaAs} \\ m_{HH,\Gamma}^* &= 0.648 \, m_0 \text{ no } \text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As} \end{aligned}$$

Somamos dois autoestados obtidos em tempo imaginário e fizemos essa soma evoluir em tempo real, a cada instante extraíndo alguma informação deste pacote, como valores esperados ou imagem da densidade de probabilidade (produto escalar do conjugado da função de onda pela função de onda em cada ponto).

III - 1

Poços duplos assimétricos - ADQW

O sistema que usamos é o da fig.III-1, onde os poços são de GaAs puro, a barreira e as fronteiras são de $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$.

fig.III-1: Potencial utilizado na banda de Condução sob ação de $0.1\text{mV}/\text{\AA}$. Os poços são de GaAs e demais regiões são de $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$. Ao lado uma representação do cristal real proposto.

Estes poços estão dentro de um poço infinito de $8\eta a$. Neste domínio, distribuímos os pontos da discretização de forma a terem as seguintes distâncias (Δx) uns dos outros:

para $-222.5A < x < 177.5A$	$\rightarrow \Delta x = 0,5A$
para $-622.5A < x < -222.5$ e $177.5 < x < 577.5A$	$\rightarrow \Delta x = 2.5A$
para $-1522.5A < x < -622.5A$ e $577.5 < x < 1477.5A$	$\rightarrow \Delta x = 10A$
para o restante do domínio	$\rightarrow \Delta x = 50A$

O campo elétrico constante atua apenas na região de $-225A < x < 182,5A$. O poço largo (WW), o poço estreito (NW) e a barreira (Barr.) apresentam os seguintes tamanhos, cuja incerteza é um intervalo de discretização:

WW	apresenta uma dimensão de	$145 \pm 0.5A$
NW	" " " "	$100 \pm 0.5A$
Barr.	" " " "	$25 \pm 0.5A$

O nível 0 de energia é tomado na origem de coordenadas. Tomamos a discretização temporal (Δt) da seguinte forma:

imaginária $\rightarrow \Delta t = 0.025$ fsi (escolhida de forma a que as autofunções converjam o mais rápido possível).

real $\rightarrow \Delta t = 0.1$ fs (quanto menor mais precisa a evolução, porém mais demorada computacionalmente)

A magnitude da discretização temporal é bem menor que os períodos oscilatórios que se pretende observar, por uma estimativa do Apêndice IV. A sua escolha, que poderia ser um pouco maior, se deve ao fato de que a discretização espacial, sendo escolhida para representar satisfatoriamente o potencial proposto, guarda uma necessária relação com a temporal para assegurar a convergência da função: $\Delta t / (\Delta x)^2 \leq 0.5$ (referência [18], página 25). Nesse intervalo, a melhor razão escolhida foi a que mais rápido e mais exatamente trouxe os resultados desejados.

Com esses parâmetros a equação diferencial de Schrödinger (2) é resolvida numericamente e analisada graficamente. Nossos resultados são expostos a seguir.

Resultados na Banda de Condução

em Tempo imaginário

Os cinco primeiros níveis de energia eletrônicos (sub-bandas de condução) para o referencial energético adotado em III-1 são:

NÍVEIS DE ENERGIA (meV)	campo (mV/A)	
	0.0	-0.097 RESS.
primeiro	-178.34	-170.14
segundo	-161.78	-165.97
terceiro	-123.84	-116.07
quarto	- 74.79	- 79.03
quinto	- 39.06	- 32.53

tab.III-1

Fez-se uma varredura dos níveis eletrônicos em função do campo elétrico aplicado para se chegar ao valor de ressonância (RESS.) indicado pela seta da fig.III-2.

fig.III-2: anti-crossing^[19] do 1.^o com o 2.^o autoestado. A densidade de probabilidade do 1.^o sai do WW e entra no NW - ver fig.III-4. O splitting de energia mínimo é 4.17meV no campo indicado pela seta (RESS.) = 0.097mV/A.

Na fig.III-3 ilustramos a representação esquemática da Banda de Condução a campo elétrico nulo e na ressonância dos dois primeiros níveis eletrônicos, com as respectivas densidades de probabilidade para os cinco primeiros autoestados.

fig.III-3: níveis e respectivas densidades de probabilidade à campo nulo (esquerda) e na ressonância (direita). Nos potenciais o pontilhado indica a extensão da localização da função. Note-se a equiprobabilidade de encontrar o elétron em qualquer dos poços na RESS. do 1º com o 2º.

O anti-crossing poderia ser observado para quaisquer outros 2 níveis consecutivos, varrendo o campo elétrico em outros valores, mas a baixa densidade de portadores e temperatura do estudo em [8] justificam a utilização dos 2 primeiros níveis apenas. Altas temperaturas ou alta densidade de portadores implicariam na não aplicabilidade do simples Hamiltoniano (01).

Não usamos campos igualmente espaçados, desde o campo nulo até se chegar à ressonância, pois podemos estimar por volta de que campo ocorrerá a ressonância dividindo a diferença energética ($E_2 - E_1$) pela diferença de posição esperada ($\langle x \rangle_2 - \langle x \rangle_1$) nos dois níveis a campo nulo, registradas na tab.III-2, varrendo-se então os campos próximos¹.

No caso:

$$\frac{E_2 - E_1}{\langle x \rangle_2 - \langle x \rangle_1} = 14.58/139.02 = 0.1048 \text{ mV/\AA} = 10.48 \text{ KV/cm}$$

A fig.III-3 ilustra os níveis obtidos, com as densidades de probabilidade eletrônicas respectivas que vão se delocalizando para níveis que vão chegando próximos ao topo dos poços (nível do fundo da Banda de Condução do $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ no ponto Γ). Ilustramos também a delocalização dos 2 primeiros níveis na ressonância.

Na fig.III-4 ilustramos a troca de característica dos autoestados 1 e 2 durante a ressonância. O autoestado 1, inicialmente (a campo muito baixo) no poço largo (WW), passa a pertencer ao poço estreito (NW), e vice-versa para o autoestado 2. Na ressonância ambos tem igual probabilidade de pertencer aos 2 poços.

¹ poder-se-ia fazer o programa de forma a varrer os campos elétricos automaticamente, utilizando-se de um critério para saber quando se obteve a convergência das autofunções, que é uma condicional dentro dos loops no programa. É útil quando não se sabe onde a ressonância ocorre.

fig.III-4: sequência mostrando o anti-crossing das funções de onda. A linha dupla é o 2.^o nível.

Na tab.III-2 resultados comparativos a campo nulo e na ressonância do primeiro com o segundo autoestado eletrônico são expostos, para isso, sejam:

$\langle k \rangle$ o valor esperado de k ,
 x a posição (Angstroms)
 V o potencial (meV),
 p_l a probabilidade de encontrar o elétron fora dos poços à esquerda da barreira,
 p_r " " " à direita da barreira,
 p_b " " " na barreira
 W_W probabilidade de encontrar o elétron no poço largo
 N_W " " " " " " " estreito

nível 1	0 mV/A	ress.	nível 2	0 mV/A	ress.
$\langle x \rangle$ A ₂	-81.39	-8.97	$\langle x \rangle$ A ₂	57.63	-8.57
$\langle x^2 \rangle$ A ₂	8000.24	5679.65	$\langle x^2 \rangle$ A ₂	4720.57	6562.08
$\langle V \rangle$ meV	-181.21	-187.08	$\langle V \rangle$ meV	-187.75	-190.24
pl	$6,24 \cdot 10^{-3}$	$2,10 \cdot 10^{-3}$	pl	$4,59 \cdot 10^{-4}$	$2,89 \cdot 10^{-3}$
pb	$9,50 \cdot 10^{-3}$	$2,24 \cdot 10^{-2}$	pb	$1,73 \cdot 10^{-2}$	$3,30 \cdot 10^{-3}$
pr	$1,41 \cdot 10^{-4}$	$8,06 \cdot 10^{-3}$	pr	$1,58 \cdot 10^{-2}$	$1,03 \cdot 10^{-2}$
WW	0,96	0.50	WW	$2,89 \cdot 10^{-2}$	0.48
NW	$1,71 \cdot 10^{-2}$	0.46	NW	0.93	0.49

nível 3	0 mV/A	ress.	nível 4	0 mV/A	ress.
$\langle x \rangle$ A ₂	-79.15	-76.89	$\langle x \rangle$ A ₂	40.56	46.02
$\langle x^2 \rangle$ A ₂	9424.50	9351.87	$\langle x^2 \rangle$ A ₂	6400.43	6474.81
$\langle V \rangle$ meV	-181.67	-172.97	$\langle V \rangle$ meV	-181.00	-167.21
pl	$3,00 \cdot 10^{-2}$	$2,59 \cdot 10^{-2}$	pl	$1,12 \cdot 10^{-2}$	$7,11 \cdot 10^{-3}$
pb	$3,31 \cdot 10^{-2}$	$4,22 \cdot 10^{-2}$	pb	$8,33 \cdot 10^{-2}$	$6,47 \cdot 10^{-2}$
pr	$1,75 \cdot 10^{-3}$	$3,12 \cdot 10^{-3}$	pr	$7,67 \cdot 10^{-2}$	$9,04 \cdot 10^{-2}$
WW	0,90	0.88	WW	0,12	0.10
NW	$3,05 \cdot 10^{-2}$	$4,23 \cdot 10^{-2}$	NW	0,70	0.73

nível 5	0 mV/A	ress.
$\langle x \rangle$ A ₂	-66.12	-67.49
$\langle x^2 \rangle$ A ₂	11150.42	11010.45
$\langle V \rangle$ meV	-160.15	-151.41
pl	0.10	$9,39 \cdot 10^{-2}$
pb	$3,61 \cdot 10^{-2}$	$5,48 \cdot 10^{-2}$
pr	$3,00 \cdot 10^{-2}$	$3,80 \cdot 10^{-2}$
WW	0,69	0.72
NW	0,12	$8,48 \cdot 10^{-2}$

tab.III-2: comparações de valores esperados e probabilidades para 5 autoestados a campo nulo e na RES S. Esses dados ilustram o comportamento das autofunções mostradas na fig. III-2.

observação: o centro do poço largo é $x=-85\text{Å}$ e o meio do NW é $x=62.5\text{Å}$; $\langle x \rangle$ desvia destes valores a campo nulo para o 1.º e 2.º autoestados respectivamente pois parte da densidade de probabilidade do autoestado penetra no outro poço (ACOPLAMENTO).

Da tab.III-2 infere-se o óbvio aumento do desvio padrão da densidade de probabilidade (parâmetro para medida da delocalização) do 1.º e 2.º níveis principalmente:

nível	$\sigma (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)^{1/2} \quad (\text{\AA})$	
	campo nulo	ressonância (-0.087mV/\AA)
1	37.09	74.83
2	37.41	80.55
3	58.21	58.65
4		
5		

← pouca
← alteração

As probabilidades indicadas na tab.III-2 quantificam certos comportamentos apenas ilustrados na fig.III-3. Observe-se a passagem de 96% de inclusão do 1º autoestado a campo nulo no WW para 50% na ressonância., e de 3% do 2º autoestado para 48% . Situação inversa entre tais estados no NW. Os demais autoestados não sofrem alterações significativas com esses campos.

III - 1 - 1 - 2

em Tempo Real

Nesta seção 4 pacotes-de-onda são observados em sua evolução temporal, a saber:

- 1º → composto da soma do 1º com o 2º autoestado do Hamiltoniano com campo elétrico ressonante desses autoestados
→ Efeito Túnel perfeitamente observável

→ [(1+2)ress]
- 2º → 1º + 2º autoestado do Hamiltoniano a campo nulo

→ [(1+2)E=0]
- 3º → 3º + 4º " " " que ressona os dois primeiros níveis

→ [(3+4)ress]
- 4º → 3º + 4º " " " a campo nulo

→ [(3+4)E=0]

Todos são observados em seu respectivo Hamiltoniano e os autoestados componentes tem o mesmo peso (1/√2).

A energia esperada² de cada pacote é constante, pois não há termo dissipativo no Hamiltoniano, mas apresentou a oscilação mostrada na fig.III-5, causada pela escolha da discretização temporal Δt^3 e cuja causa é puramente numérica, sem implicações físicas. Note a energia esperada no instante inicial como sendo exatamente a média aritmética das autoenergias formadoras do pacote (168.05meV para [(1+2)ress]). A variação é tolerável pois tem uma amplitude de $\sim 1\text{meV}$, muito menor que o valor absoluto indicado.

fig.III-5: oscilação da energia total do pacote: $\langle \psi | H | \psi \rangle$. Diminuindo-se a discretização temporal tal amplitude diminui, mas demora-se mais tempo computacional para evolui-las.

² não é a energia medida do elétron. A energia que se mede é uma das autoenergias, correspondentes a uma das autofunções componentes com incerteza ditada por Heisenberg: $\Delta E \Delta t \geq h$. Fazendo-se um gráfico com as energias medidas, este será uma distribuição centrada na energia esperada.

³ a validade do método depende da hipótese de Glauber (apêndice-I) e da relação Δt com Δx (ver pag.25 da ref.[18]).

fig.III-6: sequência de imagens mostrando a evolução do pacote [(1+2)ress]. Este período de oscilação está em acordo com o esperado pelo splitting de energia (apêndice-IV). As linhas verticais representam os limites dos poços.

Registrrou-se a densidade de probabilidade do pacote [(1+2)ress], em vários instantes de sua evolução, na fig.III-6. Este pacote é o causador da emissão eletromagnética, em TeraHertz, de [8]. A primeira e a última densidades são idênticas, como será mostrado nos demais resultados. A oscilação tem período 993.4 fs e é o mais próximo que se pode chegar de uma "visão" do elétron "andando" na heteroestrutura (pois não tem trajetória precisa pelo princípio da incerteza).

Para este pacote e para os demais as figs.III-7,8 e 9 apresentam as probabilidades de encontrar o elétron no poço largo, estreito e na barreira, respectivamente.

Do pacote [(1+2)res.] nas fig.III-6,7,8 vê-se que em certos instantes o elétron praticamente não tem probabilidade de estar num poço e após meio período ele tem quase 100% de chance de estar ali.

fig.III-7: probab. de encontrar o elétron no WV.

fig.III-8: probabilidade de estar no NW.

fig.III-8:probabil. de estar dentro da barreira.

A posição do centro do pacote [(1+2)res.] (fig.III-10) varia de quase o centro do WW até quase o centro do NW, oscilando em torno de $x=8.5A$ (não é centrado no meio da barreira pela assimetria dos poços). O centro do pacote [(3+4)res.] oscila em torno de $x=-14.4A$ mas não chega aos centros dos poços e o elétron nem mesmo perde a probabilidade de ser encontrado num dos poços (fig.III-7,8).

A campo nulo, os gráficos sugerem vagamente uma oscilação com frequência $\Delta E/h$, mas o pacote não sai de seu poço.

Os pacotes [(3+4)] variam mais a posição de seus centros que os [(1+2)] por enfrentarem uma barreira de potencial menor.

fig.III-10: $\langle \psi | x | \psi \rangle$. Observe-se as posições dos poços na fig.III-3.

As figs.III-11 e 12 indicam, para todos os pacotes, uma variação de "velocidade" e momento típica de um movimento oscilatório. Mas indicam valores esperados para todos os pacotes. Na verdade os pacotes diferentes de [(1+2)ress.] representam uma partícula (elétron) que não perde a probabilidade de estar num determinado poço; assim, uma oscilação típica seria apenas a de [(1+2)ress.].

fig.III-11: $\langle \psi | v | \psi \rangle$ (velocidade esperada). Embora a variação desta no tempo seja marcante a amplitude não varia tanto para pacotes soma dos mesmos níveis, pois depende da profundidade no poço do pacote.

Devemos observar que a fig.III-11 é $\langle 1/m P \rangle$ e não $\langle P 1/m \rangle = \langle v \rangle$ que é a velocidade esperada propriamente dita.

Classicamente sabemos que $\langle v \rangle = \partial \langle x \rangle / \partial t$;
Quanticamente (referência [05], cap.III, (D-27)):

$$\frac{d\langle A \rangle}{dt} = \frac{1}{i\hbar} \langle [A, H] \rangle + \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle$$

no caso: $\langle [X, H] \rangle / (i\hbar) = \langle \frac{P}{m} \rangle$, mais especificamente: $\langle P \frac{1}{m} \rangle$

e $\partial X / \partial t = 0$ pois o Observável X não tem dependência temporal (X possui classicamente), quem a terá será o quet $|\psi\rangle$ quando projetado na base $\langle x|$:

$$\langle x | \psi \rangle = \psi(x, t)$$

Portanto, $\langle v \rangle = \partial \langle x \rangle / \partial t$ é válido quanticamente, porém $v = P (1/m)$ e não $(1/m) P$ como foi mostrado na fig.III-11; daí as aspas em "velocidade". $\langle 1/m P \rangle$ é diferente de $\langle P 1/m \rangle$ pois m é função de x . Assim esta fig.III-11 não é a derivada da fig.III-10. Fatalmente (não foi plotado) $\langle P 1/m \rangle$ apresentará agudos picos para $[(1+2)E=0]$ correspondendo à derivada (projeção do operador P na base $|x\rangle$) da fig.III-10 e cuja causa é a abrupta variação da massa específica do elétron nas interfaces $\text{GaAs-Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$.

fig.III-12: momento esperado. Relacionado à fig. III-11.

Para os pacotes:

[(1+2)ress.]	o período calculado pela evolução foi de 893.4 fs.
[(3+4)ress.]	" " " " " " 111.6 fs.
[(1+2) E=0]	" " " " " " 283.8 fs.*
[(3+4) E=0]	" " " " " " 83.9 fs.*

*O período dos pacotes à E=0mV/A foi calculado baseado no gráfico de $\langle v \rangle$ ou $\langle p \rangle$ que apresentam maior uniformidade.

Estes períodos estão em grande concordância com o resultado esperado pela diferença de autoenergia dos autoestados formadores do pacote (apêndice-IV), como será comparado em III-1-3.

Outros resultados:

fig. III-13: $\langle \psi | x^2 | \psi \rangle$ Interessante para o cálculo do desvio padrão em função de t .

Estes gráficos ilustram $\langle x^2 \rangle$ que junto com $\langle x \rangle^2$ dão idéia de como evolui a dispersão, ou delocalização dos pacotes pelo cálculo do desvio padrão $\sigma = (\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2)^{1/2}$.

Banda de Valência

Na BV encontramos os seguintes níveis dos buracos (sub-bandas de valência):

NÍVEIS DE ENERGIA (meV)	campo (mV/A)	
	0.0	-0.097 RESS.
HH1	-84.14	-93.35
HH2	-81.84	-78.69
LH1	-76.05	-84.12
LH2	-67.44	-63.05

tab.III-3

Como esperado, os buracos pesados estão em níveis mais profundos que os leves pela diferença de massa. Note-se o não alinhamento dos níveis embora na Banda de Condução o elétron experimente a ressonância.

Na fig.III-15 mostramos as densidades de probabilidade destes buracos cujos níveis estão esquematizados na fig.III-14.

Alguns resultados comparativos no campo elétrico nulo e no campo que causa a ressonância entre os 2 primeiros níveis eletrônicos são mostrados na tab.III-4.

fig. III-14: diagrama esquemático da BV do ADQW com respectivos níveis dos buracos. O prolongamento das linhas indica a localização aproximada do buraco.

fig. III-15: densidade de probabilidade dos dois primeiros buracos. As linhas verticais indicam o limite dos poços. Observe a maior localização dos HHs em relação aos LHs pela sua maior massa.

HH1	0 mV/A	ress.	HH2	0 mV/A	ress.
$\langle x \rangle$ A ₂	-86.76	-99.88	$\langle x \rangle$ A ₂	54.57	21.44
$\langle x^2 \rangle$ A ₂	8430.90	10809.64	$\langle x^2 \rangle$ A ₂	4633.87	4495.19
$\langle V \rangle$ meV	-86.25	-95.80	$\langle V \rangle$ meV	-85.80	-83.38
pl	$1,55 \cdot 10^{-3}$	$4,08 \cdot 10^{-3}$	pl	$3,01 \cdot 10^{-4}$	$1,54 \cdot 10^{-3}$
pb	$1,21 \cdot 10^{-3}$	$4,00 \cdot 10^{-4}$	pb	$4,48 \cdot 10^{-3}$	$8,93 \cdot 10^{-3}$
pr	$6,07 \cdot 10^{-6}$	$3,30 \cdot 10^{-6}$	pr	$3,27 \cdot 10^{-3}$	$1,47 \cdot 10^{-3}$
WW	0,99	0.99	WW	$4,91 \cdot 10^{-2}$	0.27
NW	$2,15 \cdot 10^{-3}$	$9,83 \cdot 10^{-4}$	NW	0.94	0.71

LH1	0 mV/A	ress.	LH2	0 mV/A	ress.
$\langle x \rangle$ A ₂	-71,70	-90.00	$\langle x \rangle$ A ₂	46.26	41.53
$\langle x^2 \rangle$ A ₂	7587.30	9488.24	$\langle x^2 \rangle$ A ₂	5493.41	4776.09
pl	$1,21 \cdot 10^{-2}$	$2,21 \cdot 10^{-2}$	pl	$3,08 \cdot 10^{-3}$	$6,47 \cdot 10^{-3}$
pb	$2,85 \cdot 10^{-2}$	$1,16 \cdot 10^{-2}$	pb	$2,61 \cdot 10^{-2}$	$5,57 \cdot 10^{-2}$
pr	$1,24 \cdot 10^{-3}$	$3,83 \cdot 10^{-5}$	pr	$3,13 \cdot 10^{-2}$	$2,14 \cdot 10^{-2}$
WW	0,89	0.95	WW	$9,90 \cdot 10^{-2}$	$9,99 \cdot 10^{-2}$
NW	$6,76 \cdot 10^{-2}$	$7,99 \cdot 10^{-3}$	NW	0,84	0.81

tab. III-4: comparações entre LH e HH na res. e a campo nulo.

Esses resultados refletem a grande localização dos buracos num poço ou noutro, tanto a campo nulo quanto na ressonância dos 2 primeiros níveis eletrônicos; exceto talvez o HH2, na ressonância, que tem 27% de chance de estar no WW e 71% de estar no NW.

Estas localizações garantirão transições eletrônicas BV→BC para poços bem determinados.

ADQW - Conclusões

Utilizando os cálculos em tempo imaginário, temos as seguintes principais energias necessárias às transições das sub-bandas de valência para a BC (eV)⁴:

Campo (KV/cm)→	POÇOS - split = 4.2meV		
	0.0	-9.7	
HH1 → BC1	1.539 WW	1.536 WW	eV
HH1 → BC2	1.553 NWd	1.540 WW	
HH2 → BC1	1.541 WWd	1.550 NW*	
HH2 → BC2	1.556 NW	1.555 NW*	
LH1 → BC1	1.547 WW	1.545 WW	
LH1 → BC2	1.561 NWd	1.549 WW	
LH2 → BC1	1.556 WWd	1.566 NW	
LH2 → BC2	1.557 NW	1.570 NW	

tab.IIIC-1: energias fotônicas necessárias a algumas transições BV→BC. O d indica que o buraco fica no poço oposto (deslocado) ao elétron. Como na RESS. o elétron está completamente delocalizado entre os poços, o índice WW ou NW é devido à localização do buraco. O * indica que parte da densidade de probabilidade do elétron ficará no WW.

Estes resultados implicam que para se obter o pacote-de-onda como soma do 1.^o com o 2.^o autoestado da Banda de Condução no WW (poço largo) e na ressonância, devemos aplicar um campo elétrico de 9.7KV/cm, e deve-se usar um laser cujos fótons tenham uma energia $h\nu$ cuja dispersão tenha:

$$1.536\text{eV} \leq h\nu < 1.550 \text{ eV (ideal)}$$

O menor valor (1.536 eV) é a energia mínima HH1-BC1 e o maior (1.550 eV) é a energia HH2-BC1, na qual a transição provém de buracos no NW.

Uma dispersão energética dessas, no laser, implicaria em transições tanto HH1-BC1,2 quanto LH1-BC1,2, e seria conseguida se o laser tiver 1.543eV e $\Delta\lambda/2$ de 3.7nm.

⁴ soma-se a diferença de energia entre o fundo do poço e a sub-banda de condução com a diferença entre o fundo do poço e a sub-banda de valência e com o gap do GaAs à 10K = 1.519 eV.

Para transições apenas do HH1, nosso cálculo indicou ser necessário um laser de 1.538eV (média das transições de HH1) com meia-dispersão máxima de 6.3nm, resultado muito interessante por ser o esperado devido à referência [8], onde os autores desejavam transições apenas de HHs e para isso utilizaram um laser de 1.54eV e meia dispersão de 7nm. Na referência também foi encontrado o campo de ressonância como sendo 10.5KV/cm, muito próximo ao nosso resultado.

A dispersão $\Delta\lambda/2$ é calculada de modo a não excitar elétrons para o NW (vindos de HH2).

A assimetria dos poços, característica que deveria garantir uma localização dos buracos, não a fez satisfatoriamente quanto ao HH2 (fig.III-15).

A diferença de auto-energia HH-LH se mantém constante, na precisão possível (~1meV), dentro de cada poço, pois depende da massa específica e da geometria específica do poço⁵. Este resultado é mostrado na tab.IIIc-2.

		campo nulo	res.	
Poço	HH1(WW) - LH1(WW)	8.09	9.23	neV
	HH2(NW) - LH2(NW)	14.2	15.64	

tab.IIIc-2: diferença de energia entre HHs e LHs.

Para as transições dos HHs, a tab.IIIc-1 mostra a nossa concordância com os resultados teóricos de [8] mais explicitamente quando tais valores são graficados (fig.IIIc-1).

Outra concordância é nossa variação do splitting de energia com o campo elétrico (fig.IIIc-2), que mesmo sem efeitos excitônicos mostra-se próxima aos valores de [8].

⁵ Prova disso é a maior diferença ocorrer para o HH2-LH2 nos fios (ver conclusões dos fios III-2-3).

fig. III C-1: a) transição HH, b) espectro respectivo. O pontilhado é teórico sem éxciton, o ⊕ indica valores obtidos nessa dissertação.

fig. III C-2: split teórico com éxciton (linha cheia), resultados experimentais de [8] (quadrados) e resultados deste trabalho (⊕).

Pequenas diferenças dos resultados aqui obtidos com os resultados teóricos indicados em [8], na fig.IIIc-1, podem ser atribuídas ao uso de diferentes sistemas⁶ ou ao uso de massas específicas ou mesmo profundidades dos poços ligeiramente diferentes (na referência não é indicado estes valores para o cálculo teórico).

A diferença no período de oscilação dos poços (~800fs em [8]-experimental e 993.4fs aqui-numérica) explica-se pela exclusão dos efeitos excitônicos do Hamiltoniano neste estudo. Estes aumentam o split de energia (fig.IIIc-2) pois é uma energia de ligação → diminuem o período de oscilação (apêndice IV). Outros efeitos menores podem existir^[20].

Todos os gráficos oscilantes em tempo real apresentaram o respectivo período, função da diferença de energia dos autoestados componentes (apêndice IV), condizente (tab.IIIc-3).

Pacote	período calculado (fs)	
	pela evolução	pelo split $h/\Delta E$
[(1+2)res.]	993.4	991.2
[(3+4)res.]	111.6	111.6
[(1+2) E=0]	283.8	283.6
[(3+4) E=0]	83.9	84.7

tab.IIIc-3

O que demonstra que certos resultados podem ser inferidos tanto do algoritmo em tempo real quanto do imaginário; no caso a diferença de energia entre os níveis eletrônicos.

⁶em [8] há 10 ADQW em sequência; aqui há apenas 1.

Os fios de GaAs têm $(145 \pm 5) \text{Å}$ por $(100 \pm 5) \text{Å}$ o fio largo (WWi) e $(100 \pm 5) \text{Å}$ por $(100 \pm 5) \text{Å}$ o fio estreito (NWi), separados por $(25 \pm 5) \text{Å}$ e dispostos como na fig.III-16.

fig.III-16:

esquemático do diagrama potencial experimental pelo elétron na BC ou buraco na BV. A depressão é GaAs e demais espaços: $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$. Note que o centro de coordenadas não se situa exatamente no centro da barreira.

O domínio x (de $\sim 2 \text{ nm}$) foi discretizado em 79 pontos da seguinte forma:

$-97.5 \text{Å} < x < 102.5 \text{Å}$	$\rightarrow \Delta x = 5 \text{Å}$
$-397.5 \text{Å} < x < -97.5 \text{Å}$ e $102.5 \text{Å} < x < 402.5 \text{Å}$	$\rightarrow \Delta x = 20 \text{Å}$
demaís intervalos	$\rightarrow \Delta x = 120 \text{Å}$

¹ Asymmetric Double Quantum Wire - ADQWi. Procuramos mencionar aqui apenas detalhes diferentes dos da seção III-1.

O domínio y (de $\sim 3\eta m$) foi discretizado em 119 pontos:

-222.5A < y < 177.5A	$\rightarrow \Delta y = 5A$
-522.5A < y < -222.5A e 177.5A < y < 477.5A	$\rightarrow \Delta y = 30A$
-822.5A < y < -522.5A e 477.5A < y < 777.5A	$\rightarrow \Delta y = 60A$
demais intervalos	$\rightarrow \Delta y = 140A$

Embora os programas apresentem entrada para atuação do campo elétrico na direção $\vec{x}$, neste estudo apenas agiu o campo na direção $\vec{y}$. O campo elétrico (constante) é aplicado apenas na região $-252.5A < y < 237.5A$.

O referencial nulo para o potencial coincide com a origem de coordenadas. Valores de diferença de banda e massas específicas indicados em III-1.

A discretização temporal imaginária é 1fsi; e a real é 0.25fs.

III - 2 - 1

na Banda de Condução

III - 2 - 1 - 1

em Tempo Imaginário

Os três primeiros níveis eletrônicos (sub-bandas) que encontramos na BC estão na tab.III-5 seguinte.

tab.III-5

NÍVEIS DE ENERGIA (meV)	campo (mV/A)	
	0.0	-0.0925 RES.
primeiro	-144.22	-138.65
segundo	-130.19	-134.28
terceiro	-93.30	-86.40

2

² observe a óbvia elevação dos níveis em relação aos poços, devido ao confinamento.

O campo elétrico de ressonância entre os dois primeiros níveis foi obtido pelo varredura dos níveis em função do campo elétrico, mostrada na fig.III-17.

fig.III-17: anti-crossing dos dois primeiros autoestados. A seta indica o campo de ressonância (-0.0925 mV/A $\hat{y}$); nele há o split mínimo de energia: 4.39 meV . A visualização da troca de característica dos autoestados é apresentada na fig.III-18 e 19.

Na fig.III-18 mostramos uma representação esquemática dos potenciais, com respectivos níveis, e as densidades de probabilidade dos autoestados a campo nulo e na ressonância.

Junto com a fig.III-19, a fig.III-18 indica a troca de característica dos dois autoestados ao passarem pela ressonância.

fig. III-18: representação do potencial, com respectivos níveis de densidade de probabilidade a campo nulo e na ressonância.

fig. III-19: densidade de probabilidade logo após a ressonância. Observe junto com a fig. III-18 a mudança de localização do autoestado 1 e 2 de um fio a outro.

Para nossos autoestados, a tab.III-6 mostra alguns resultados comparativos a campo nulo e na ressonância.

nível 1	0 mV/A	res.	nível 2	0 mV/A	res.
<x> A	2.48	2.48	<x> A	2.48	2.48
<y> A ₂	-78.50	-7.36	<y> A ₂	58.77	-5.72
<x ² > A ₂	625.77	633.03	<x ² > A ₂	636.22	628.98
<y ² > A ₂	7622.82	5822.54	<y ² > A ₂	5047.88	6590.89
<xy> A ₂	-195.47	-18.41	<xy> A ₂	148.21	-14.35
<V> meV	-184.48	-180.33	<V> meV	-180.76	-183.77
pl	3,90.10 ⁻²	1,93.10 ⁻²	pl	1,87.10 ⁻³	1,93.10 ⁻²
pr	1,05.10 ⁻²	2,43.10 ⁻²	pr	1,81.10 ⁻²	3,20.10 ⁻³
pb	9,35.10 ⁻⁴	2,47.10 ⁻²	pb	4,96.10 ⁻²	2,88.10 ⁻²
WWi	0.92	0.48	WWi	3,43.10 ⁻²	0.48
NWi	1,98.10 ⁻²	0.44	NWi	0.89	0.48

nível 3	0 mV/A	res.
<x> A	2.48	2.48
<y> A ₂	-75.82	-72.98
<x ₂ > A ₂	663.15	666.00
<y ₂ > A ₂	9139.73	9034.48
<xy> A ₂	-188.14	-181.25
<V> mV	-173.38	-165.19
pl	6,80.10 ⁻²	6,22.10 ⁻²
pr	3,57.10 ⁻²	4,61.10 ⁻²
pb	3,91.10 ⁻³	6,65.10 ⁻³
WWi	0.85	0.83
NWi	3,53.10 ⁻²	4,87.10 ⁻²

tab. III-6

Tais resultados implicam os seguintes aumentos no desvio padrão da densidade de probabilidade eletrônica:

nível	campo elétrico (KV/cm)			
	0.0		9.25	
	$\sigma_x (A)$	σ_y	σ_x	σ_y
1	24.9	38.2	25.0	74.6
2	25.1	39.9	25	81

↑ _____ ↑
óbvia delocalização na direção $\hat{y}$ apenas,
onde o campo elétrico é aplicado.

Do campo nulo para a ressonância a possibilidade do elétron estar no W_i passa de 92% para 48% no 1.^o autoestado e de quase nula para 46% no 2.^o. No NW_i , o 1.^o passa de quase nula para 44% e o 2.^o de 89% para 48%. O 3.^o autoestado não sofre alteração significativa, e assim devem se comportar os demais autoestados.

III - 2 - 1 - 2

em Tempo Real

Nesta seção dois pacotes de onda são observados em sua evolução, a saber:

a) $\rightarrow$ composto da soma do 1.^o com o 2.^o autoestado do Hamiltoniano com campo ressonante $\rightarrow$ Efeito Túnel completo

$\rightarrow [(1+2)ress]$

b) $\rightarrow$ 1.^o + 2.^o autoestado do Hamiltoniano a campo nulo

$\rightarrow [(1+2)E=0]$

Ambos são observados em seu respectivo Hamiltoniano e os autoestados componentes tem o mesmo peso ($1/\sqrt{2}$).

A energia esperada de cada pacote, que é constante fisicamente para o Hamiltoniano proposto, apresentou a oscilação³ que mostramos na fig.III-20 pela escolha da discretização temporal. Note-se a baixa amplitude de variação em comparação com o valor absoluto da energia que torna tal variação numericamente desprezível. As exatas médias aritméticas das autoenergias dos autoestados formadores são 137.2 meV para o [(1+2)E=0] e 136.4 meV para o [(1+2)ress], próximas aos valores oscilantes indicados.

fig.III-20: oscilação da energia total do pacote: $\langle \psi | H | \psi \rangle$. Diminuindo-se a discretização temporal tal amplitude diminui, mas se demora mais tempo computacional para sua evolução.

A fig.III-21 mostra o pacote [(1+2)res.] em vários instantes de sua evolução, acusando um período de oscilação de 922.5fs.

³ observação semelhante a da fig.III-5.

fig.III-21: sequência de imagens mostrando a evolução do pacote [(i+2)res.]. Este período de oscilação está de acordo com o esperado pelo splitting de energia (apêndice-IV)

Nas figs.III-22, 23 e 29 mostramos como evoluem no tempo as probabilidades de encontrarmos o elétron no fio largo (WWi), estreito (NWi) e na região $-10 < y < 15\text{\AA}$, respectivamente.

fig.III-22: probabil. de encontrar o elétron no WWi.

fig.III-23: probabil. de encontrar o elétron no NWi.

Essas figuras indicam que o pacote [(1+2)ress.] "sai" completamente de um fio e entra no outro com o período indicado. Assim, tal pacote pode ser usado para a observação da dinâmica de pacotes de onda pois, como veremos na Banda de Valência, o buraco fica "parado" gerando um dipolo elétrico oscilante.

As figs.III-24 e 25 mostram $\langle y \rangle$ e $\langle x \rangle$ respectivamente. Delas conclue-se que o elétron "não se mexe" na direção $\hat{x}$, pois as variações mostradas são englobadas pela precisão ditada pela discretização ($\pm 5\text{\AA}$), e que o centro do pacote [(1+2)ress] vai de quase o centro de um fio até quase o centro do outro.

fig. III-24: $\langle \psi | y | \psi \rangle$. Observe-se as posições dos fios na fig. III-16.

fig. III-25: $\langle \psi | x | \psi \rangle$. Neste gráfico o eixo de coordenadas x foi deslocado em relação à fig. III-15 por volta de 100Å.

fig. III-26: $\langle \psi | y^2 | \psi \rangle$, útil no cálculo do desvio padrão do pacote.

Observando as figs. III-24 e 25 imagina-se que o momento eletrônico tenha um comportamento estranho para o pacote formado pelos autoestados a campo nulo pois estaria relacionado à

derivada de $\langle y \rangle$ ou $\langle x \rangle$, porém, a fig.III-28 indica um gráfico típico de movimento harmônico na direção $\hat{y}$ apenas. A causa disso é discutida na seção III-1, referente às figs.III-11 e 12, e as variações na direção $\hat{x}$ são irrelevantes para nossa precisão, implicando no valor nulo de $\langle v_{\hat{x}} \rangle$ ou $\langle P_{\hat{x}} \rangle$.

fig.III-27: $\langle \psi | v_x | \psi \rangle = 0$ • $\langle \psi | v_y | \psi \rangle$ (velocidade esperada na direção $\hat{y}$). Embora a diferença no período seja marcante a amplitude difere pouco pois depende da profundidade do pacote no poço (semelhante nos dois casos).

fig.III-28: momento esperado. Diretamente relacionado à fig.III-27.

fig. III-29: $\langle x^2 \rangle, \langle xy \rangle, \text{prob.}$ de
 estar na barreira. Referentes
 ao pacote res.

Dos resultados em tempo real anteriores, obtivemos os seguintes períodos de oscilação dos pacotes:

Para o pacote [(1+2)res.] o período calculado foi de 922fs.
 " " " [(1+2) E=0] " " " " 298fs.

obs.: o período do pacote com autoestados a campo nulo foi calculado baseado no gráfico de $\langle v \rangle$ ou $\langle p \rangle$ que apresentam maior uniformidade.

Em III-2-3 mostraremos a concordância dos períodos obtidos em tempo real com o esperado pela diferença de energia dos autoestados formadores.

Banda de Valência

Na Banda de Valência (BV) temos os seguintes primeiros dois níveis dos buracos:

NÍVEIS DE ENERGIA (meV)	campo (mV/A)	
	0.0	-0.0925 RESS.
HH1	-79.80	-88.43
HH2	-77.71	-80.38
LH1	-57.45	-64.88
LH2	-49.09	-44.93

tab.III-07

Com esses valores esquematizamos a BV na fig.III-30.

fig.III-30: diagrama esquemático da BV do ADQW com respectivos níveis dos buracos a campo nulo (esquerda) e no campo que causa a ressonância dos 2 primeiros níveis eletrônicos (direita).

⁴ Óbvia elevação dos níveis em relação aos buracos dos poços, pelo maior confinamento.

Os buracos apresentam as densidades de probabilidade ilustradas na fig.III-31.

fig.III-31: dens.de probabilidade dos 2 primeiros buracos leves e pesados. Diferente dos poços, o HH2 na res. se localiza no WWi. Obs.: o sentido para baixo, nesses gráficos, é positivo.

Realizando integrais sobre as autofunções, obtivemos os seguintes resultados comparativos a campo nulo e a -9.25KV/cm:

HH1	0 mV/A	res.	HH2	0 mV/A	res.
<x> A	2.49	2.49	<x> A	2.49	2.49
<y> A ₂	-82.40	-102.73	<y> A ₂	84.84	-78.82
<x ² > A ₂	462.52	462.78	<x ² > A ₂	463.04	463.63
<y ² > A ₂	7865.56	11251.04	<y ² > A ₂	4683.68	7866.04
<xy> A ₂	-208.01	-256.83	<xy> A ₂	162.11	-197.06
<V> meV	-85.89	-76.00	<V> meV	-85.32	-77.71
pl	7,98.10 ⁻³	1,12.10 ⁻²	pl	8,38.10 ⁻⁶	1,44.10 ⁻²
pr	1,33.10 ⁻³	1,75.10 ⁻⁴	pr	3,49.10 ⁻³	2,84.10 ⁻³
pb	3,81.10 ⁻⁶	3,07.10 ⁻⁸	pb	1,01.10 ⁻²	1,26.10 ⁻⁶
WWi	0.98	0.98	WWi	8,18.10 ⁻⁴	0.98
NWi	4,26.10 ⁻⁴	2,95.10 ⁻⁶	NWi	0.98	1,38.10 ⁻⁴

LH1	0 mV/A	res.	LH2	0 mV/A	res.
<x> A	2.41	2.41	<x> A	2.40	2.39
<y> A ₂	-67.40	-87.78	<y> A ₂	44.22	35.76
<x ² > A ₂	829.02	826.79	<x ² > A ₂	845.89	865.89
<y ² > A ₂	7225.19	9178.57	<y ² > A ₂	5952.56	5262.90
<xy> A ₂	-163.26	-211.98	<xy> A ₂	106.14	87.06
<V> meV	-76.77	-69.21	<V> meV	-74.88	-75.58
pl	7,48.10 ⁻²	9,21.10 ⁻²	pl	1,34.10 ⁻²	2,37.10 ⁻²
pr	2,98.10 ⁻²	1,29.10 ⁻²	pr	2,80.10 ⁻²	6,34.10 ⁻²
pb	7,71.10 ⁻³	8,55.10 ⁻⁴	pb	9,27.10 ⁻²	7,75.10 ⁻²
WWi	0.81	0.88	WWi	0.11	0.12
NWi	7,35.10 ⁻²	8,95.10 ⁻³	NWi	0.75	0.70

tab.III-8: comparações entre LH e HH na res. e a campo nulo.

Os dados da tab.III-8 mostram a intensa localização dos buracos na ressonância eletrônica (diretamente nas linhas WWi e NWi), garantindo a transição eletrônica para um dos fios apenas.

Note-se que nenhum valor esperado é modificado drasticamente com a aplicação deste baixo campo elétrico. Mesmo o HH2 permanece intensamente localizado, diferente dos HH2 dos poços (tab.III-4).

ADQWi - Conclusões

Utilizando os cálculos do tempo imaginário, tem-se as seguintes principais energias necessárias às transições da BV para a BC (eV):

Campo (KV/cm)→	FIOS - split = 4.4meV		
	0.0	-9.25 $\hat{y}$	
HH1 → BC1	1.575 WWi	1.572 WWi	eV
HH1 → BC2	1.589 NWid	1.577 WWi	
HH2 → BC1	1.577 WWid	1.580 WWi	
HH2 → BC2	1.591 NWi	1.585 WWi	
LH1 → BC1	1.598 WWi	1.598 WWi	
LH1 → BC2	1.612 NWid	1.600 WWi	
LH2 → BC1	1.806 WWid	1.816 NWi	
LH2 → BC2	1.620 NWi	1.620 NWi	

tab.IIIC-4: energias fotônicas necessárias a algumas transições BV→BC. O d indica que o buraco fica no fio oposto (deslocado) ao elétron. Como na RES. o elétron está completamente delocalizado entre os fios, o índice WW ou NW é devido à localização do buraco. O * indica que parte da dens. de prob. do elétron ficará no WWi.

Esses resultados implicam que para se obter o pacote de onda soma do 1.^o com o 2.^o autoestado da BC no WW (desejado na ressonância), deve-se usar um laser cujos fótons tenham uma energia $h\nu$ tal que:

$$1.572\text{eV} \leq h\nu < 1.616\text{eV} \text{ (ideal)}$$

Se quisermos transições vindas do HH1, LH1 e HH2, precisaremos, portanto, de um laser de 1.594eV e $\Delta\lambda/2$ de 11nm.

Mas para promover transições até o meio dos dois primeiros níveis eletrônicos na ressonância [(BC1+BC2)/2] vindo apenas do primeiro nível de buraco pesado, usa-se um laser de 1.574eV com meia-dispersão máxima de 20nm.

A diferença de auto-energia HH-LH se mantém constante dentro de um mesmo fio, na precisão possível (~1meV). Para localizações diferentes nos fios a diferença é bem maior (tab.IIIc-5).

		campo nulo	res.	meV
Fio	HH1(WWi) - LH1(WWi) HH2(WWi) - LH2(NWi)	22.35 * 28.62	23.57 * 35.43	

tab.IIIc-5: diferença de energia entre HHs e LHs para os fios.
* maior diferença pela diferente localização.

Isto mostra a dependência da diferença de energia dos níveis de fios acoplados, não só com a massa da partícula, mas também com a geometria do fio a que pertençam os buracos.

Os dois pacotes oscilantes em tempo real apresentam o respectivo período função da diferença de energia dos autoestados componentes (apêndice IV) condizente, comparados na tab.IIIc-6.

Pacote	período calculado (fs)	
	pela evolução	pelo split $h/\Delta E$
[(1+2)res.]	922	942.1
[(1+2) E=0]	296	294.8

tab.IIIc-6

O que demonstra que certos resultados podem ser inferidos tanto do algoritmo em tempo real quanto do imaginário também nos fios; no caso a diferença de energia entre os níveis eletrônicos.

ADQW ou ADQWi apresentam éxcitons cujas energias de ligação podem chegar a vários meVs^[24]. Polaritons, resultado da interação do elétron com o fóton do laser incidente, tem efeitos mínimos; idem para polarons (fônons). Como a velocidade da luz é 3000A/fs, da fig.III-11 ou fig.III-27 nota-se que efeitos relativísticos são quase nulos pela baixa velocidade esperada do elétron.

O resultado dos poços é muito interessante pois na referência [8] o laser usado tem 1.54eV e $\Delta\lambda/2$ de 7nm, onde desejavam apenas transições providas dos buracos pesados (HHs), principalmente o HH1. Nossos resultados foram capazes de prever qual o laser exato para a observação desejada, mesmo sendo o nosso sistema desprovido de efeitos excitônicos. O laser necessário aos fios necessitaria ser menos monocromático, dependendo da excitação desejada, fato causado pelo maior espaçamento entre os níveis energéticos, pelo confinamento.

A asssimetria dos poços, característica que deveria garantir uma localização dos buracos, não a fez satisfatoriamente quanto ao HH2 dos poços (tab.III-4); mas este efeito tem pouca importância pois não se deseja promover excitações deste HH2 no experimento referido. E se por acaso houver tal excitação, por exemplo se a banda do laser for um pouco maior que o esperado, o pacote não ficará completamente no NW pois parte ficará no WW proporcionalmente à probabilidade de estar no WW (tab.III-4).

A diferença de auto-energia HH-LH se mantém constante, na precisão possível (~1meV), dentro de cada poço ou fio, pois depende da massa específica e da geometria específica do poço. Prova disso é a maior diferença ocorrer para o HH2-LH2 nos fios pois localizam-se em fios diferentes.

Considerando apenas as transições providas dos HHs dos poços da tab.IIIc-1, há boa concordância com os resultados teóricos da ref.[8] (fig.IIIc-1). Para as demais transições não encontramos referências aplicáveis, principalmente quanto aos fios, onde são raros os trabalhos, pelas dificuldades de crescimento.

Pequenas diferenças dos nossos resultados nos poços com os resultados teóricos de [8] (fig.IIIc-1) justificam-se pela diferença de sistemas ou de parâmetros, como massas específicas ou profundidade dos poços.

O período de tunelamento dos fios (922fs) é bem próximo ao dos poços (993.4fs), indicando uma estreita dependência deste período com a barreira a ser tunelada (a mesma nos fios e poços, igual a 25Å).

Todos os gráficos oscilantes em tempo real apresentaram o respectivo período condizente com a diferença de energia dos autoestados componentes (apêndice IV)(tabs.IIIc-3 e 6), indicando a coerência do algoritmo em tempo real com o imagiário.

Os pacotes diferentes do [(1+2)res.] não são interessantes experimentalmente para a dinâmica de pacotes pois não ficam completamente num poço (ou fio) ou noutro alternadamente, não gerando um momento dipolar oscilante intenso para observação da emissão eletromagnética, além de oscilarem muito rapidamente¹.

Resultados quânticos básicos, como a elevação dos níveis nos fios em relação aos poços pelo maior confinamento, o não alinhamento completo dos níveis na ressonância, o menor desvio padrão da densidade de probabilidade quando uma partícula é mais pesada (HH) que outra (LH), etc. são facilmente visualizados com esta resolução numérica da Equação de Schrödinger, o que sugere a utilização dos nossos programas para o Ensino de Mecânica Quântica.

¹obs.: TeraHertz - capacidade atual de manipulação de sinais (é a ordem da frequência de oscilação dos pacotes observados).

A discretização espacial dos fios quânticos foi precária, devido a limitações computacionais, pois as funções de onda ocupam muito espaço de memória, além do compute gastar muito tempo de CPU. Pretendemos utilizar o método para estudos de super-redes de fios quânticos, sobre influência de campos magnéticos ou dopagem. Para tais sistemas, muito grandes, já disponho de área no super-computador CRAY do Centro Nacional de Supercomputação; e em breve teremos tais resultados.

Apêndice I

Dedução de Glauber

$$\text{se } A \text{ e } B \text{ comutam com } [A, B] \rightarrow e^A e^B = e^{A+B} e^{\frac{[A, B]}{2}}$$

prova: seja $F(t) = e^{At} e^{Bt}$

$$\rightarrow \frac{\partial F}{\partial t} = A e^{At} e^{Bt} + e^{At} B e^{Bt} = (A + e^{At} B e^{-At}) F$$

$$\text{como } [e^{At}, B] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} [A^n t^n, B] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} [A^n, B]$$

$$\begin{aligned} \text{supondo } [A^2, B] &= [A, B]A + A[A, B] = 2A[A, B] \\ [A^{n+1}, B] &= (n+1)A^n [A, B] \\ [A^n, B] &= [AA^{n-1}, B] = [A, B]A^{n-1} + A[A^{n-1}, B] = nA^{n-1}[A, B] \end{aligned}$$

(provado por indução finita)

$$\begin{aligned} \rightarrow [e^{At}, B] &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} nA^{n-1}[A, B] = t \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(At)^{n-1}}{(n-1)!} \right\} [A, B] = \\ &= t e^{At} [A, B] = t[A, B] e^{At} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rightarrow e^{At} B &= B e^{At} + [A, B] t e^{At} \\ &\rightarrow e^{At} B e^{-At} = B + t[A, B] \end{aligned}$$

$$\rightarrow \frac{\partial F}{\partial t} = [A + B + t[A, B]] F$$

$$\frac{dF}{F} = [(A+B) + [A, B]t] dt \quad \text{pela hipótese } [A+B, [A, B]] = 0$$

$$\rightarrow F(t) = F(0) e^{(A+B)t + 1/2 [A, B]t^2} = e^{At} e^{Bt}$$

$$\rightarrow F(1) = e^A e^B = e^{A+B} + 1/2 [A, B]$$

$$\rightarrow e^{A+B} = e^A e^B e^{-1/2 [A, B]}$$

Apêndice II

Unidades

Espaço
Energia
Tempo

Angstroms
meV (é a ordem das diferenças de Bandas)
fs (ordem dos tempos de tunelamento)

$$\begin{aligned} \rightarrow h &= 4135,7 \text{ meV.fs} & h &= 658,22 \text{ meV.fs} \\ m_0 &= 56,86 \frac{\text{meV(fs)}^2}{\text{\AA}^2} & & \text{massa de repouso do elétron} \\ c &= 3000 \text{ \AA/fs} & & \text{velocidade da luz no vácuo} \end{aligned}$$

Sejam ψ_1 (e ψ_2) o primeiro autoestado de um poço (ou fio) isolado. Faz-se um pacote $\psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2$ soma dos autoestados de poços isolados.

$$\rightarrow E = \frac{\int \psi^* H \psi}{\int \psi^* \psi}$$

obs.: $\int \psi_i^* \psi_j \rightarrow$ overlap integral (S_{ij})

$\int \psi_i^* H \psi_j \rightarrow$ exchange integral (H_{ij})

Para poços ou fios simétricos $\rightarrow S_{ij} = S_{ji} \quad H_{ij} = H_{ji}$

$$\Leftrightarrow E = \frac{c_1^2 H_{11} + 2 c_1 c_2 H_{12} + c_2^2 H_{22}}{c_1^2 S_{11} + 2 c_1 c_2 S_{12} + c_2^2 S_{22}} \quad \text{pela normalização } S_{ii}=1$$

a menor energia possível será tal que:

$$\frac{\partial E}{\partial c_1} = 0 \quad \frac{\partial E}{\partial c_2} = 0$$

$$\rightarrow \begin{cases} c_1 (H_{11} - E) + c_2 (H_{12} - E S_{12}) = 0 \\ c_1 (H_{21} - E S_{21}) + c_2 (H_{22} - E) = 0 \end{cases}$$

Para o sistema linear homogêneo acima apresentar solução:

$$\rightarrow E = \frac{H_{11} + H_{12}}{1 + S_{12}} \quad \text{ou} \quad \frac{H_{11} - H_{12}}{1 + S_{12}} \quad \rightarrow \Delta E = 2H_{12}/(1+S_{12})$$

$$\downarrow \quad \downarrow$$

$$c_1 = c_2 \quad c_1 = -c_2$$

¹ análise idêntica a da molécula de H_2

Seja n_1 (n_2) primeiro autoestado do poço (fio) 1 (2) isolado.

Sejam (v_1 e v_2) primeiros 2 autoestados de poços (fios) acoplados:

à v_1 corresponde uma autoenergia E_1 e portanto uma frequência angular

$$\omega_1 = E_1/\hbar$$

à v_2 corresponde uma autoenergia E_2 e portanto uma frequência angular

$$\omega_2 = E_2/\hbar$$

Na aproximação de Tight Binding:

$$v_1 = (n_1 + n_2) 1/\sqrt{2} \text{ (simétrica)}$$

$$v_2 = (n_1 - n_2) 1/\sqrt{2} \text{ (anti- ")}$$

obs.: simétrica $\rightarrow$ energia menor que anti-simétrica.

Seja o pacote $P = (v_1 e^{-i\omega_1 t} + v_2 e^{-i\omega_2 t})/\sqrt{2}$

a evolução temporal de $4P^*P$ será

$$\begin{aligned} &= n_1^* n_1 (e^{+i\omega_2 t} + e^{+i\omega_1 t}) (e^{-i\omega_1 t} + e^{-i\omega_2 t}) \\ &+ n_2^* n_2 (e^{+i\omega_1 t} - e^{+i\omega_2 t}) (e^{-i\omega_1 t} - e^{-i\omega_2 t}) \\ &+ n_1^* n_2 (e^{+i\omega_2 t} + e^{+i\omega_1 t}) (e^{-i\omega_1 t} - e^{-i\omega_2 t}) \\ &+ n_2^* n_1 (e^{+i\omega_1 t} - e^{+i\omega_2 t}) (e^{-i\omega_2 t} + e^{-i\omega_1 t}) = \\ &= n_1^* n_1 (1 + e^{+i(\omega_2 - \omega_1)t} + e^{+i(\omega_1 - \omega_2)t} + 1) \\ &+ n_2^* n_2 (1 - e^{+i(\omega_1 - \omega_2)t} - e^{+i(\omega_2 - \omega_1)t} + 1) \\ &+ n_1^* n_2 (e^{+i(\omega_2 - \omega_1)t} - e^{+i(\omega_1 - \omega_2)t}) \\ &+ n_2^* n_1 (e^{+i(\omega_1 - \omega_2)t} + e^{+i(\omega_2 - \omega_1)t}) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= n_1^* n_1 \{2 + 2 \cos[(\omega_2 - \omega_1)t]\} + \\ &+ n_2^* n_2 \{2 - 2 \cos[(\omega_1 - \omega_2)t]\} + \\ &+ n_1^* n_2 \{2i \sin[(\omega_2 - \omega_1)t]\} + \\ &+ n_2^* n_1 \{2i \sin[(\omega_1 - \omega_2)t]\} \end{aligned}$$

$$\rightarrow P^*P = n_1^* n_1 \cos^2 \left(\frac{\omega_2 - \omega_1}{2} t \right) + n_2^* n_2 \sin^2 \left(\frac{\omega_2 - \omega_1}{2} t \right) + i/2 \sin[(\omega_2 - \omega_1)t] (n_1^* n_2 - n_2^* n_1)$$

Assim, a densidade de probabilidade de encontrar a partícula ora é completamente a dens. do poço (fio) 1 isolado, ora é a do 2, com um período $T = 2\pi / (\omega_2 - \omega_1) = h / (E_2 - E_1)$. A última parcela é pequena pois n_1 e n_2 não se sobrepõe muito.

Apêndice V

Programas

No disquete anexo há uma listagem dos programas, numa versão recente, em tempo real e imaginário, para os fios.

Em tempo real é necessário acrescentar os cálculos que se deseja efetuar com a fç. de onda no instante desejado. Em tempo imaginário há somente os cálculos dos autoestados e autoenergias.

Apêndice VI

TESTES

OBS.: Todos os computos foram feitos no VAX-6000-420 do IFQSC, programas em FORTRAN-77 sem processamento vetorial e todas as variáveis com precisão simples (apêndice V). Gráficos foram feitos com o Software PLOTDATA-version#10.20-06/1991.

Inicialmente testou-se em tempo imaginário. A primeira aplicação foi no poço $\propto 1D$. Mesmo o programa sendo rebuscado e lento obteve-se bons resultados:

fig. AVI-1: a) evolução das autoenergias em tempo imaginário e b) autofunções de um poço ∞ 1D (não são os mesmos poços). A evolução é típica para todos os resultados; nesse caso poderia ser truncada em $\sim 150 \text{ fs}$ (nos programas não há um teste de

convergência pois sendo uma condicional a mais nos loops, esmoreceria mais o programa). Em a) as setas indicam o não cruzamento das linhas pela ortonormalização dos estados.

Gradativamente o programa foi sendo melhorado e agilizado. Aplicação a poço ∞ 2D:

1^o AUTOEST.
∞

$x = 11,11$
 $y = 11,11$
 $128,62 \text{ meV}$
 62 p/cont.
1301

202,62 meV
53 p/cont.

2^o AUTOEST.
∞

3^o AUTOEST.
∞

325,34 meV
36 p/cont.

fig. AVI-2: 3 primeiros autoestados de um poço 2D retangular. Abaixo 4. autoestado de um poço quadrado e na pag. seguinte o 5.º.

4^o AUTOESTADO
∞

125,11 meV

163 p/cont.

48 x 48 p/cont.

TEÓRICOS (meV):

48 Å ⇒ 130,56

49 Å ⇒ 125,29

50 Å ⇒ 120,32

$\Delta x = 1 \text{ Å}$

y
49 Å

x
49 Å

Sistemas 2D simples com 30×30 pontos demoravam quase 1min/passo de tempo imaginário de CPU; assim a aplicação proposta inicialmente em super-redes ^[29x25] de fios quânticos (fig.seguinte) teve de ser adiada.

fig.AVI-3: potencial de fios quânticos e do primeiro auto-estado da minibanda ainda não convergido.

Incluiu-se subrotinas que diagonalizavam a matriz $\langle i | H | j \rangle_v$ (H o Hamiltoniano; i, j variam de 1 ao n^o de níveis desejados; v indica que é uma função velha, que após a diagonalização torna-se uma nova melhorada). O k-ésimo autovetor dessa matriz tem como n-ésima componente o coeficiente do autoestado $|n\rangle$ (autoestado do H) que compõe a k-ésima função velha. De posse desses autovetores cria-se uma nova função soma apenas dos autoestados desejados, o que agiliza a ortogonalização.

Além disso, mais e mais o programa é melhorado.

Aplicou-se o programa em dois fios assimétricos, com discretização não-uniforme de domínio espacial (Apêndice-VIII - para, com o mesmo número de pontos, pôr a barreira ∞ mais distante, evitando sua interferência nos fios). Usou-se a massa de repouso do elétron e -295.3eV de profundidade dos fios (mais pesado e mais profundo a convergência é mais rápida):

fig.AVI-4: potencial usado.

fig.AVI-5: anti-crossing dos 2 primeiros níveis. A grande proximidade dos níveis se deve ao baixíssimo overlap dos 2 estados em questão.

A precisão no cálculo dos níveis reflete-se no "ruído" da figura seguinte:

fig.AVI-6: sob o campo de ressonância, ampliação da evolução imaginária dos 2 níveis em questão. O ruído reflete a precisão do método.

A seguir, 5 autoestados à 3 campos diferentes (fig.AVI-7), onde nota-se a troca de fios para alguns autoestados.

fig. AVI-7:5 primeiros autoestados para o sistema da fig. AVI-4 sob campos elétricos diferentes.

Para o ADQWi do capítulo III-2, o cálculo de 3 autoestados (tempo imaginário) demora por volta de nove segundos por passo de tempo. O ADQW é por volta de 10 vezes mais rápido. Se a função inicial for próxima do autoestado, com ~100 passos é possível obter-se os autoestados. Pelo "chute" que usamos, levou-se quase 1000 passos para obtermos as primeiras autofunções. Tendo estas, as utilizamos como chute inicial para a execução do programa com outro campo elétrico, sendo pois necessários às vezes apenas 50 passos para a convergência quando o campo elétrico era próximo.

Apêndice VII

Algoritmo de Thomas

(18)

As equações são:

$$a_i u_{i-1} + b_i u_i + c_i u_{i+1} = d_i$$

$$1 \leq i \leq R$$

$$a_1 = c_R = 0 \quad \leftarrow \text{significa colocar}$$

uma barreira infinita antes do primeiro e depois do último ponto. Assim, nossos poços são estudados como se estivessem dentro de um outro tipo caixa infinita. Tais barreiras infinitas devem ser colocadas longe o suficiente para não interagirem com o sistema estudado.

$$\begin{aligned} \text{primeiro compute: } \beta_i &= b_i - (a_i c_{i-1}) / \beta_{i-1} & \beta_1 &= b_1 \\ \gamma_i &= (d_i - a_i \gamma_{i-1}) / \beta_i & \gamma_1 &= d_1 / b_1 \end{aligned}$$

então, a variável dependente será:

$$u_R = \gamma_R \quad u_i = \gamma_i - (c_i u_{i+1}) / \beta_i$$

$$f(x+\Delta_2) = f(x) + \Delta_2 f'(x) + \frac{\Delta_2^2}{2} f''(x) \quad (1)$$

$$f(x-\Delta_1) = f(x) - \Delta_1 f'(x) + \frac{\Delta_1^2}{2} f''(x) \quad (2)$$

$$(1+2) \rightarrow f(x+\Delta_2) + f(x-\Delta_1) = 2f(x) + (\Delta_2 - \Delta_1)f'(x) + \frac{(\Delta_2^2 + \Delta_1^2)}{2} f''(x) \quad (3)$$

$$(1-2) \rightarrow f(x+\Delta_2) - f(x-\Delta_1) = (\Delta_2 + \Delta_1)f'(x) + \frac{(\Delta_2^2 - \Delta_1^2)}{2} f''(x) \quad (4)$$

$$(4) \rightarrow f'_n = \frac{f_{n+1} - f_{n-1}}{\Delta_n + \Delta_{n+1}} + \frac{\Delta_n + \Delta_{n+1}}{2} f''_n \quad (5)$$

$$(5-3) \rightarrow f''_n = \left[\frac{2}{\Delta_{n+1}(\Delta_n + \Delta_{n+1})} \right] f_{n+1} + \left[\frac{2}{\Delta_n(\Delta_n + \Delta_{n+1})} \right] f_{n-1} + \left[\frac{2}{\Delta_n \Delta_{n+1}} \right] f_n$$

² muito útil quando, para certas regiões, a função de onda é nula (ou quase), podendo-se poupar pontos cujo cálculo computacional seria supérfluo; ou então, com um mesmo número de pontos, colocar a barreira ∞ o mais longe possível.

Referências Bibliográficas

- [01] *Physics Today* de 02/1980 (é um número especial sobre avanços tecnológicos em Física de Semicondutores).
- [02] Aschcroft/Mermin - "*Solid State Physics*" - international edition.
- [03] K. Ploog - "*Molecular Beam Epitaxy of III-V Compounds*" - Crystals: growth, properties and applications - Springer, Verlag Berlin Heidelberg, 1980.
- [04] Gerald Bastard - "*Wave Mechanics applied to Semiconductor Heterostructures*" - les éditions de physique.
- [05] Hiroyuki Sakaki - "*Scattering Suppression and High-Mobility Effect of Size-Quantized Electrons in Ultrafine Semiconductor Wire Structures*" - Japanese Journal of Applied Physics - vol.19, n.º 12, 12/1980, pag. L735-L738.
- [06] B. P. van der Gaag and A. Scherer - "*Microfabrication below 10nm*" - Appl. Phys. Lett. - 56(5), 29/01/1990 - pg.481.
- [07] "*Nanostructure Physics and fabrication*" - (Proceeding of the International Symposium - College Station, Texas, March 13-15, 1989) - edited by Mark A. Reed, Wiley P. Kirk - Academic Press (1989).
- [08] Hartmut G. Roskos, Martin C. Nuss, Jagdeep Shah, Karl Leo, David A. B. Miller, A. Mark Fox, Stefan Schmitt-Rink, Klaus Köhler - "*Coherent Submillimeter-Wave Emission from Charge Oscillation in Double-Well Potential*" - Physical Review Letters - vol. 68, n.º 14, 06/04/1992. pag. 2216.
- [09] "*Advances in Solid State Physics*" - Karl Leo, 1992.

- [10] Serge Luryi - "Polarization Oscillations in Coupled Quantum Wells - A Scheme for the Generation of Submillimeter Electromagnetic Waves" - Journal of Quantum Electronics, vol.27, n^o.1, January 1991, pag. 54.
- [11] Marcos Henrique Degani - Appl. Phys. Lett., 59(1), 57 (1991).
- [12] J. A. Fleck, Jr., J. R. Morris, and M. D. Feit - "Time-Dependent Propagation of High Energy Laser Beams through the Atmosphere" - Applied Physics - 10, 129-160, 1976, pg. 129.
- [13] Abraham Goldberg and Harry M. Schey, Judah L. Schwartz - "Computer-Generated Motion Pictures of One-Dimensional Quantum-Mechanical Transmission and Reflection Phenomena" - American Journal of Physics - vol. 35, n^o 3, March 1967, pg. 177.
- [14] M. D. Feit and J. A. Fleck, Jr. - "Wave Packet dynamics and chaos in the Xenon-Xelles system" - J. Chem. Phys. 80 (6), 15 March 1984, pag. 2578.
- [15] M. D. Feit and J. A. Fleck, Jr. - "Solution of the Schrödinger equation by a spectral method 99: Vibrational energy levels of triatomic molecules" - J. Chem. Phys. 78(1), 1 Jan. 1983, pag. 301.
- [16] Ľ. Hrivnák - "Determination of Γ electron and light hole effective masses in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ on the basis of energy gaps, band-gap offsets, and energy levels in $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$ quantum wells" - Appl. Phys. Lett., 56(24), 11/06/1990, pg. 2425.
- [17] Sadao Adachi - " GaAs , AlAs , and $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$: Material parameters for use in research and device applications" - J. Appl. Phys., 58(3), 01/08/1985, pag. R1.
- [18] Dale U. von Rosenberg - "Methods for the Numerical Solution of Partial Differential Equations" - American Elsevier Publishing

Company, 1975.

- [19] Cohen-Tannoudji - "Quantum Mechanics" - Wiley-Interscience.
- [20] A. Hernández-Cabrera, P. Aceituno and H. Cruz - "Self-consistent calculations of coherent tunneling oscillations in asymmetric double quantum wells" - Superlattices and Microstructures, vol.11, n^o 4, 1992, pg. 375.
- [21] F. M. Peeters and J. E. Golub - "Binding energy of the barbell exciton" - Physical Review B - vol.43, n^o 6, 15/02/1991, pg. 5159.
- [22] Donard de Cogan - "Solid State Devices - a quantum physics approach" - (Nottingham).
- [23] E. E. Mendez, F. Agulló-Rueda, and J. M. Hong - "Stark Localization in GaAs-GaAlAs Superlattices under an Electric Field" - Physical Review Letters - vol. 60, n^o23, 06/06/1988, pg. 231.
- [24] F. Agulló-Rueda, E. E. Mendez, H. Ohno and J. M. Hong - "Interaction between extended and localized states in superlattices" - Physical Review B - vol. 42, n^o 2, 15/07/1990, pg. 1470.
- [25] P. Tronc and C. Cabanel, J. F. Palmier, B. Etienne and B. Sermage - "Stark Localization in GaAs-GaAlAs Superlattices under a low Electric Field" - Superlattices and Microstructures, vol. 9, n^o 2, 1991, pg. 2426.
- [26] K. V. Shalíмова - "Física de los Semiconductores" - editorial Mir - Moscú - 1975.
- [27] V. Stupelman and G. Filaretov - "Semiconductor Devices" - Mir publishers - Moscow - 1981.