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

**"Simulação Numérica de Escada Stark, Estados Localizados e Dinâmica de
Pacote de Ondas em Super-Redes de AlGaAs/GaAs". 0K**

DIOGENES BOSQUETTI

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

Orientador: Prof.Dr. Oscar Hipólito

SÃO CARLOS

SÃO PAULO

1995

IFSC UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO
Instituto de Física de São Carlos

Av. Dr. Carlos Botelho, 1465
CEP 13560-250 - São Carlos - SP
Brasil

Fone (016) 272-6222
Fax (016) 272-2218

MEMBROS DA COMISSÃO JULGADORA DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO DE
DIOGENES BOSQUETTI APRESENTADA AO INSTITUTO DE FÍSICA DE SÃO CARLOS, DA
UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO, EM 15 DE DEZEMBRO DE 1995.

COMISSÃO JULGADORA:

Prof. Dr. Oscar Hipólito

Prof. Dr. Lidério Citrângulo Ioriatti Junior

Prof. Dr. Marcelo Zoega Maialle

À minha família

Aristides Wanderley Bosquetti (in memorian)

Maria Corbi Bosquetti

Péricles Bosquetti

e

Sandra Fabiana Rodgher

AGRADECIMENTOS

Meu sincero obrigado aos professores Oscar Hipólito, Lidério C. Ioriatti Júnior, Silvestre Ragusa, José Eduardo Hornos, Valter Líbero, Marcos Henrique Degani e Valmir Chitta pelas dicussões ministradas ao longo destes anos.

Agradeço aos alunos da pós-graduação do IFSC, José Eduardo Manzoli, Virgílio dos Anjos, Alexandre Camilo Jr., Salviano A. Leão, João Vítor Batista Ferreira, Ubiraci Pereira da Costa Neves, Mauro Masili, Márcio Araújo Souza e Washington Luiz Carvalho Lima pelo companheirismo e gostoso convívio.

ÍNDICE

<u>Resumo</u>	VI
<u>Abstract</u>	VI
<u>Introdução</u>	1
<u>1 - Técnica Computacional</u>	11
1.1 - Método do Split-Operator	11
1.2 - Tempo Imaginário e suas Propriedades	13
1.3 - Sumário do capítulo 1	16
<u>2. - Super-Redes não dopadas</u>	18
2.1 - auto-funções e número de poços da super-rede	18
2.2 - Número de poços e largura da mini-banda	20
2.3 - Auto-Energias e número de poços da super-rede	22
2.4 - Sumário do capítulo 2	24
<u>3 - Auto-Estados de Superfície</u>	25
3.1 - Auto-Funções dos estados de tamm e comprimento do poço largo	25
3.2 - Auto-Energias em função do comprimento do poço largo	27
3.3 - Estados de tamm e mínimo e máximo de energia da mini-banda	29
3.4 - Mudança de posição do poço mais largo	30
3.5 - Sumário do capítulo 3	33
<u>4 - Efeito Stark em super-redes</u>	34
4.1 - Auto-funções em função do campo elétrico	35
4.2 - Auto-energias em função do campo elétrico	37
4.3 - Valores Esperados em função do campo elétrico	39
4.4 - Tunelamento induzido pelo campo	40
4.5 - Sumário do capítulo 4	42
<u>5 - Ressonância entre auto-estados</u>	43
5.1 - Ressonância entre níveis subsequentes	44
5.2 - Forma das auto-funções na condição de ressonância	47
5.3 - Frequências de oscilação dos níveis ressonantes	49
5.4 - Sumário do capítulo 5	51

<u>6 - Dinâmica de pacotes de ondas</u>	52
6.1 - Amplitudes de correlação de pacotes de ondas	53
6.2 - Confinamento espacial dos pacotes de ondas	54
6.3 - Valores esperados do potencial e evolução das energias do pacote	56
6.5 - Criação dos pacotes através de um laser	57
6.6 - Sumário do capítulo 6	59
<u>7 - Conclusões</u>	60
<u>Apêndices</u>	64
A - Fórmula de Glauber	64
B - Aproximação da energia cinética	66
C - Algoritmo de Thomas	67
D - Dispersão de uma super-rede	69
E - Sistema de medidas	71
F - Tabelas de valores dos auto-estados	72
<u>Referências Bibliográficas</u>	80

RESUMO

Foram simuladas super-redes finitas de $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ com três, cinco, sete e nove poços idênticos a fim de se estudar a forma das auto-funções e a largura das mini-bandas de energia.

O fato da super-rede ser finita não produz estados localizados de superfície, que podem ser conseguido alterando-se o comprimento de um dos poços do sistema. Esta quebra introduz estados confinados às imediações deste poço denominados Estados de Tamm. Eles não participam da mini-banda pois tem energias diferentes. Investigamos o comportamento dos auto-estados em função da posição e tamanho do poço com alargamento diferente dos demais.

Fixado o tamanho e o número de poços do sistema, obtivemos uma inclinação do potencial da heteroestrutura pela aplicação um campo elétrico uniforme. Este fato levou à localização dos auto-estados e à formação da denominada escada Wannier-Stark para campos fracos e ao tunelamento de alguns portadores para fora dos poços no regime de campos fortes.

Para determinados valores de campo, foi obtida a ressonância entre níveis pois conforme se variava a inclinação produzida pelo campo, alguns níveis se aproximavam dos outros.

As propriedades dinâmicas da super-rede foram analisadas através da elaboração de pacotes de ondas contendo três e quatro auto-estados, para diferentes valores do campo elétrico.

ABSTRACT

Here, we simulated finites superlattices of $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ with three, five, seven and nine identical quantum wells to study the form of eigenfunctions and width of minibands.

When one makes one of the quantum wells enlarged, we obtain some states that do not participate of mini-bands. These states are called Tamm-states and are localized in the large well neighborhood. We take into account several values of widths and places of the different well.

Once fixed the width and number of the quantum wells in the superlattice, we can bend the potential of the heterostructure by application of one electric field. This fact became all the waves function localized and the system forms one Wannier-Stark ladder.

Ressonances can be obtained for specific values of electric fields. Some dynamical properties were analysed when we made two wave packets and start propagating in time of these packets in the heterostructure. We did it for two different values of electric field.

INTRODUÇÃO

Neste trabalho, estudaremos o comportamento dos auto-estados de elétrons e buracos numa super-rede finita não dopada, na aproximação de bandas independentes. Os parâmetros relevantes ao estudo deste sistema serão o aumento do número de poços na super-rede finita, a presença de um campo elétrico externo e os efeitos de alargamento de um dos poços, com a produção de estados localizados.

O grande avanço da micro-eletrônica nas últimas décadas viabilizou a construção de computadores rápidos, de grande capacidade de armazenamento e manipulação de dados. Tornou-se comum resolver a equação de Schrödinger numericamente, aplicando métodos desenvolvidos para a solução de equações de derivadas parciais, com as devidas condições de contorno. A ferramenta computacional para as investigações que serão efetuadas em nosso trabalho será a técnica do Split-Operator que foi inicialmente utilizado em dinâmica molecular^[1,2,3] mas tem sido aplicada com sucesso no estudo de heteroestruturas^[4,5,6], apresentando as seguintes propriedades:

- pode ser aplicada a qualquer tipo de potencial não divergente,
- apresenta pouca sensibilidade à forma inicial das funções de onda,
- boa estabilidade numérica e rápida convergência dos resultados,
- permite o estudo de auto-funções, auto-energias e valores esperados dos operadores,
- possibilita o estudo de transientes e evoluções temporais de pacotes de ondas.

No primeiro capítulo, descreveremos a maneira pelo qual, usando a técnica do Split-Operator, podemos obter a evolução temporal das funções de onda de um sistema, bem como encontrar suas auto-energias e seus valores esperados.

Fig. I - Esquema de uma super-rede de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}$. A descontinuidade nas bandas de energia devido à abrupta diferença nas composições químicas neste sistema geram degraus no potencial experimentado pelos elétrons e buracos na direção perpendicular ao plano de crescimento epitaxial. Os sistemas são do tipo I, que garante o confinamento de elétrons e buracos nas mesmas regiões da heteroestrutura.

Uma super-rede semicondutora, como a mostrada na Fig. I, pode ser construída pela alternância de camadas ultra-finas de dois materiais distintos. É desejável que os materiais da super-rede possuam diferentes *gaps* de energia (larguras de bandas proibidas) e constantes de rede similares, propiciando um “casamento” quase perfeito em suas interfaces. Isto possibilita o aparecimento de poços e barreiras quânticas, fabricados por elementos dos grupos III-IV, II-IV e IV-VI. Dentre as mais comuns, destacam-se as formadas por arseneto de gálio (GaAs) e arseneto de gálio com alumínio ($\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, onde “x” é a concentração de alumínio na liga).

Numa super-rede, as funções de onda que determinam seus auto-estados se espalham ao longo da heteroestrutura, formando mini-bandas análogas às dos sólidos cristalinos^[7,8]. A largura da mini-banda (diferença entre o estado fundamental e o último estado excitado) dependerá da largura dos poços, espessura e altura das barreiras e do tipo de portador considerado. Numa mesma heteroestrutura, as mini-bandas eletrônicas possuem as maiores larguras enquanto que as de buracos pesados são as mais estreitas. No segundo capítulo será estudado o comportamento dos auto-estados e valores esperados em função do número de poços de uma super-rede finita, conforme mostramos na Fig.II. Analisaremos também como a largura da mini-banda e a separação média das energias dos auto-estados evoluem com o número de poços do sistema.

Fig. II - Mini-Bandas de Energia para buracos leves de uma Super-Rede de $\text{Al}_{0.20}\text{Ga}_{0.80}\text{As}/\text{GaAs}$ com 3,5, 7 e 9 poços de 40 angstroms cada um, separados por barreiras de 15 Å de espessura e a altura das barreiras é de 200 meV.

Uma maneira de destruir a simetria de translação da super-rede é tornar a largura de um dos poços diferente dos outros. Com a presença deste poço mais largo, surgem auto-estados confinados às proximidades do mesmo, com energias diferentes das existentes nas mini-bandas (Estados de Superfície ou de Tamm^[9,10]). Apesar destes

estados não participarem da mini-banda, pode ocorrer interações entre estes estados e os da mini-banda. Devido a impossibilidades de se crescer heteroestruturas livres de centros de espalhamentos, vibrações térmicas e imperfeições de qualquer espécie, foi somente em 1990 que a primeira observação experimental^[11] dos estados de superfície foi possível.

a) auto-funções de buracos leves em função da largura do poço situado na extremidade da super-rede

b) auto-funções de buracos leves em função da mudança da posição do poço mais largo

Fig. III - a): Estados localizados em função do aumento do comprimento do poço da extremidade. O poço comum possui 40 Å e a barreira 15 Å de espessura e 192 meV de altura (para a banda de valência). O poço mais largo possui 80, 120, 160 e 200 Å, sendo designados por 2L, 3L, 4L e 5L. b): A translação do poço mais largo altera as funções de onda. O poço mais largo possui um comprimento de 60 Å.

No terceiro capítulo, verificaremos as mudanças na forma das auto-funções e nos valores das auto-energias e valores esperados da posição $\langle X \rangle$ em função da largura e da posição do poço mais largo (vide Fig. III).

Outro fator de quebra de simetria é a inclinação do potencial na heteroestrutura pela aplicação de um campo elétrico uniforme na direção de crescimento^[12,13] (veja Fig. IV). Este entortamento provoca o decréscimo do *overlap* das auto-funções dos poços isolados do sistema e produz uma “escada” de auto-funções distribuídas seqüencialmente ao longo da super-rede (Escada Wannier-Stark^[14,15,16]). Apesar da previsão teórica ter sido feita em 1959, este efeito ainda não tinha sido observado até no final da década de 60, gerando controvérsias na literatura^[17,18,19]. Em meados de 1970, Esaki e Tsu propuseram sua ocorrência nas super-redes^[20], que foi experimentalmente verificada por Mendez e Voisin 20 anos depois. Hoje já se observam escadas Wannier-Stark até mesmo em temperatura ambiente^[21,22].

No capítulo 4, simularemos estas escadas para diversos valores de campo elétrico. Serão analisadas as mudanças da forma das auto-funções, valores das auto-energias, valores esperados da posição $\langle X \rangle$ e largura da mini-banda em função do campo. Também investigaremos o limite em que a inclinação do potencial possibilita a saída de portadores dos poços.

Fig. IV - Esquema geral da Escada Wannier-Stark para os buracos leves da banda e valência para campos de 30, 60 e 90 kV/cm, comparadas com a mini-banda a campo zero. Para valores de campo superiores a 60 kV/cm, os auto-estados mais externos possuem energias suficientes para vencer a barreira e tunelam para fora dos poços (tunelamento induzido pelo campo elétrico). Para estes estados, suas auto-funções se concentram nas extremidades do sistema.

A diferença de energia entre dois níveis quaisquer depende do tipo de portador e do campo aplicado na heteroestrutura. Se esta diferença tender a zero, acontecerá a ressonância entre estes dois níveis^[23,24,25,26], modificando a forma de suas auto-funções, como pode ser visto na Fig V. Haverá uma oscilação na região de *overlap* destas auto-funções ao passo que os outros níveis permanecerão localizados. Estas ressonâncias se processam somente para valores bastante específicos de campo elétrico. Qualquer desvio deste valor destrói esta condição, pela interferência dos estados próximos. Mostraremos ainda que se existir ressonância numa das bandas e auto-estados não-ressonantes nas outras^[27,28], ocorrerão dipolos elétricos oscilantes.

Fig V - a): Para valores determinados de campo elétrico, pode acontecer ressonâncias entre níveis. Nesta figura, podemos perceber que o quinto e o sexto níveis estão bem mais próximos um do outro do que os demais. Podem ocorrer outras ressonâncias envolvendo estados diferentes para outros valores de campo elétrico. b): Módulo das Funções de onda dos níveis ressonantes destes auto-estados.

Desde sua primeira verificação experimental em heteroestruturas de dupla barreira de $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ^[29], o interesse por este tipo de fenômeno tem chamado atenção pela possibilidade de se construírem emissores de radiação. A primeira observação experimental destas ressonâncias em sólidos foi feita em 1992^[30], num sistema de dois poços quânticos assimétricos acoplados. Naquele trabalho, 14 oscilações foram observadas antes da destruição da coerência do pacote. Simulações computacionais

deste sistema foram feitas em 1993 por Manzoli et. al.^[31]. A extensão destas oscilações de dupla barreira para 3, 4, ..., poços acoplados (que formam mini-bandas), passam a se chamar Oscilações de Bloch^[32,33,34,35]. As primeiras observações experimentais destas oscilações em super-redes de GaAs/Al_xGa_{1-x}As aconteceram em 1992^[36].

Diferenças entre os níveis de energia dos auto-estados de buracos leves em função do campo elétrico:

a) primeiro nível em relação aos demais

b) segundo nível em relação aos demais

c) terceiro nível em relação aos demais

d) quarto nível em relação aos demais

e) quinto nível em relação aos demais

f) sexto nível em relação aos demais

Fig VI - Frequências de absorção ou emissão entre os níveis da banda em função do campo elétrico. Gráficos parecidos se aplicam para as bandas de buracos leves e de buracos pesados.

No capítulo 5, efetuaremos uma varredura de todas as auto-energias do sistema em função do campo elétrico para descobrir onde a diferença entre dois níveis numa mesma banda é a menor possível, mostrada na Fig VI. Para níveis não subsequentes, o mínimo de energia representa o ponto de maior interação entre os auto-estados, apesar de não se

poder considerá-los em ressonância devido às separações de energias envolvidas serem bem maiores, além de ocorrer interferências dos auto-estados intermediários. Para níveis adjacentes, serão investigados a evolução dos valores esperados da posição e velocidade, além da frequência de emissão de radiação na condição de ressonância em função do campo aplicado. Dispositivos com heteroestruturas semelhantes às consideradas em nosso trabalho possuem aplicações tecnológicas, como a possibilidade de se criar um emissor de ondas eletromagnéticas com frequências da ordem de 10^{12} Hertz.

A dinâmica dos portadores é descrita por pacotes de ondas de seus auto-estados e tem suas evoluções temporais determinadas pelas fases dos auto-estados que os compõem. Esta dinâmica é coerente se não ocorrerem processos de espalhamento^[37,38]. A forma destes pacotes dependem do número de níveis envolvidos, dos portadores considerados e do campo aplicado, conforme pode ser visto na Fig VII.

Comparação das formas dos pacotes de ondas dos buracos pesados

Fig VII - Pacotes de ondas dos buracos pesados numa super-rede finita contendo 7 poços idênticos. A largura do poço é de 40 Å, separados por barreiras de 15 Å de espessura e 192 meV de altura. A forma destes pacotes depende do número de níveis envolvidos, dos portadores considerados e do campo aplicado

Estes pacotes podem ser produzidos através de excitações óticas^[39,40,41,42] envolvendo um *laser* com frequência e largura de dispersão bem definidos. No caso dos níveis eletrônicos na banda de condução estarem vazios, pacotes de ondas eletrônicos podem ser obtidos pela transição de elétrons da banda de valência (Fig VIII). Para isto é necessário que estes elétrons absorvam a energia fornecida por algum agente externo, que no caso é o *laser*.

No capítulo 6, construiremos pacotes de ondas normalizados de elétrons e buracos. Eles serão propagados temporalmente para estudarmos a variação de algumas propriedades dinâmicas em função do campo elétrico aplicado, como os valores esperados da posição, desvio padrão da posição e amplitude de correlação (*overlap* entre a forma do pacote no instante inicial e no instante t). Calcularemos também a frequência do *laser* necessária para a formação de pacotes eletrônicos. Consideraremos que as transições para níveis da banda de condução se originarão no estado fundamental do buraco pesado de energia ϵ_{hh1} , e corresponde portanto à menor energia de excitação.

No capítulo 7, apresentaremos as conclusões finais deste trabalho.

Fig. VIII - Para se conseguir fazer um pacote de ondas eletrônico contendo os três primeiros auto-estados, a energia ϵ_L do laser deve ser tal que possibilite elétrons saltarem do ground-state de buracos pesados até os três primeiros níveis eletrônicos. Sendo ϵ_{med} a média das energias dos três primeiros níveis, a dispersão do laser $\Delta\epsilon_L = \epsilon_4 - \epsilon_{med}$ é tal que não permita a excitação do quarto auto-estado da banda de condução.

Os sistemas que serão considerados nesta dissertação serão do “tipo I” (veja a forma do potencial na Fig. VIII), para garantir o confinamento de elétrons e buracos nas mesmas regiões do espaço. Os materiais que adotaremos para as super-redes serão o GaAs e o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ por serem bastante investigados experimentalmente.

A concentração de alumínio será sempre igual a 20%, região onde a heteroestrutura se apresenta com *gap* direto, não precisando incluir fônons no Hamiltoniano. Nossos resultados se apresentarão qualitativamente semelhantes até concentrações por volta de 35%, quando então o $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ se torna de *gap* indireto (o ponto X na rede recíproca se apresenta com energia mais baixa que o ponto Γ).

Todos os cálculos que serão efetuados nesta dissertação estarão a uma temperatura de 0 Kelvin, onde os efeitos de vibrações térmicas da rede apresentam seus valores mínimos e serão desprezados.

Nestas condições, os *gaps* de energia do $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$ e GaAs serão respectivamente iguais a 2000 e 1512 meV, ao passo que as profundidades dos poços nas bandas de condução e valência ficarão em 330 e 192 meV. Os poços da super-rede possuirão 40 angstroms de largura e estarão separadas por barreiras de 15 angstroms de espessura, conforme a Fig IX. Estes parâmetros foram escolhidos de modo a aparecer apenas um auto-estado por poço para cada portador, além de tornar as funções de onda dos poços fortemente interagentes entre si, com a produção das mini-bandas de energia. Estes resultados são qualitativamente semelhantes a qualquer outro sistema que possua interações fortes.

O referencial da energia será tomado na banda de condução do $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$, de modo que todos os valores das auto-energias ligadas dos sistemas serão negativos. Para a super-rede de 7 poços, o referencial espacial será definido de 640 Å antes do aparecimento do primeiro poço do sistema. Isto será feito para colocar as regiões limítrofes do sistema longe da região na qual estamos interessados em estudar, onde a forma das funções de onda não variam, não interferindo nos cálculos a serem efetuados.

A técnica do Split-Operator possibilita o uso de um espaçamento não uniforme na discretização espacial do sistema. Devido à esta viabilidade, as distâncias espaciais serão pequenas apenas nos pontos centrais dos sistema (0.5 angstrom) enquanto que espaçamentos bem maiores (10 angstroms) ocorrerão nas regiões limítrofes do sistema (vide Fig X), onde não existem variações nas formas das auto-funções. Com isto, o número de pontos necessários à caracterização dos sistemas diminuem, assim como o tempo de CPU.

Para esta discretização, as derivadas parciais de primeira e segunda ordens no ponto “ x_j ” para uma certa função $F(x)$ serão expressas por sua expansão em série de Taylor em torno deste ponto, usando para isto os vizinhos mais próximos x_{j-1} e x_{j+1} .

Sendo $\Delta x_j = x_j - x_{j-1}$ e $\Delta x_{j+1} = x_{j+1} - x_j$, que representam as distâncias entre pontos vizinhos, conforme Fig XI, as fórmulas para $F'(x)$ e $F''(x)$ ficarão:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial x} F(x_j) = \frac{\Delta x_j}{\Delta x_{j-1} [\Delta x_j + \Delta x_{j-1}]} F(x_{j-1}) + \frac{[\Delta x_j - \Delta x_{j-1}]}{[\Delta x_j \cdot \Delta x_{j-1}]} F(x_j) + \frac{\Delta x_{j-1}}{\Delta x_j [\Delta x_j + \Delta x_{j-1}]} F(x_{j+1}) \\ \frac{\partial^2}{\partial x^2} F(x_j) = \frac{2}{\Delta x_{j-1} [\Delta x_j + \Delta x_{j-1}]} F(x_{j-1}) - \frac{2}{[\Delta x_j \cdot \Delta x_{j-1}]} F(x_j) + \frac{2}{\Delta x_j [\Delta x_j + \Delta x_{j-1}]} F(x_{j+1}) \end{cases}$$

onde $\Delta x_0 = \Delta x_1$ e $\Delta x_n = \Delta x_{n+1}$. Estas expressões serão utilizadas em quaisquer derivadas espaciais de primeira ou segunda ordem que aparecerão nesta dissertação.

Fig. XI - Esquema das distâncias de separação num sistema unidimensional de n-pontos. Estas distâncias podem variar de intervalo para intervalo, não precisando necessariamente possuir um determinado valor específico. De um modo geral, Δx_j representa a distância entre os pontos $j-1$ e j , compreendidos no intervalo de 0 a N.

Os valores das massas efetivas dos portadores no ponto Γ da zona de Brillouin para esta temperatura e concentração de alumínio serão baseados no artigo de L. Hrivnák^[43] e mostrados na tabela I:

Tabela I - Razão entre massas efetivas dos portadores e do elétron livre ($m_0 = 56,86 \text{ meV} \cdot (\text{fs}/\text{angstrom})^2$) a uma temperatura de 0 Kelvin e no ponto Γ da zona de Brillouin.

Material	m_e^*/m_0	m_{jh}^*/m_0	m_{hh}^*/m_0
GaAs	0.066	0.094	0.54
$\text{Al}_{0.29}\text{Ga}_{0.80}\text{As}$	0.086	0.097	0.57

CAPÍTULO 1

TÉCNICA COMPUTACIONAL

Neste capítulo descreveremos o método do Split-Operator, técnica computacional que utilizaremos neste trabalho. Através deste método, estudaremos a evolução temporal de auto-funções. Para permitir estabilidade e convergência, os intervalos de tempo serão da ordem de femtosegundos. Na evolução temporal da equação de Schrödinger, dizemos que a propagação da função de onda ocorrerá em tempo real, pois obteremos modificações na sua forma ao longo do tempo. Caso o tempo t seja trocado por $-it$, teremos uma equação análoga à equação de difusão, guardado os devidos coeficientes. Uma função de onda em evolução temporal nestas condições, se propagará no que chamamos de tempo imaginário^[44,45] e convergirá para o estado fundamental do sistema.

Para discutir estes dois tipos de propagação, dividiremos este capítulo da seguinte maneira: na seção 1.1 apresentaremos a evolução em tempo real de uma função de onda pelo método do Split-Operator. Na seção 1.2 discutiremos a evolução das funções de onda em tempo imaginário para obtenção dos auto-estados do sistema. As conclusões do capítulo serão efetuadas na última seção.

1.1 - MÉTODO DO SPLIT-OPERATOR

Para descrever a evolução temporal de uma determinada função de onda $|\Psi_n(t)\rangle$, escrevemos a equação de Schrödinger dependente do tempo com os operadores energia cinética $\mathbf{P}^2(\mathbf{r})/2m_n^*$ e potencial $V(\mathbf{r},t)$ no expoente^[46], da seguinte forma:

$$|\Psi_n(t + \Delta t)\rangle = \exp\left[\frac{-i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} \mathbf{H}(\mathbf{r},t) \cdot dt\right] |\Psi_n(t)\rangle = \exp\left[\frac{-i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{\mathbf{P}^2(\mathbf{r})}{2m_n^*} + V(\mathbf{r},t)\right) \cdot dt\right] |\Psi_n(t)\rangle \quad (1.01)$$

Caso o Hamiltoniano $\mathbf{H}(\mathbf{r},t+\Delta t) \cong \mathbf{H}(\mathbf{r},t) = V(\mathbf{r},t)/2 + \mathbf{P}^2(\mathbf{r})/2m_n^* + V(\mathbf{r},t)/2$, a expressão anterior torna-se:

$$|\Psi_n(t + \Delta t)\rangle = \exp\left[\frac{-i\Delta t}{\hbar} \left(\frac{V(\mathbf{r},t)}{2} + \frac{\mathbf{P}(\mathbf{r})^2}{2m_n^*} + \frac{V(\mathbf{r},t)}{2}\right)\right] |\Psi_n(t)\rangle \quad (1.02)$$

A ordem dos operadores não foi colocada ao acaso. Nesta configuração, o Hamiltoniano está adequado ao uso da fórmula de Glauber (Apêndice A), para que cada um dos operadores fique numa exponencial distinta. Pelo fato de $\mathbf{P}^2(\mathbf{r})$ e $V(\mathbf{r},t)$ não comutarem com o comutador $[\mathbf{P}^2(\mathbf{r}), V(\mathbf{r},t)]$, condição fundamental para se utilizar Glauber, devemos escolher Δt suficientemente pequeno para desprezar os termos em Δt^3 resultantes desta não-comutatividade sem acarretar erros consideráveis ou divergências numéricas. Assim sendo, podemos escrever que:

$$|\Psi_n(t + \Delta t)\rangle = \exp\left[\frac{-i\Delta t}{2\hbar} V(\mathbf{r},t)\right] \cdot \exp\left[\frac{-i\Delta t}{2\hbar m_n^*} \mathbf{P}(\mathbf{r})^2\right] \cdot \exp\left[\frac{-i\Delta t}{2\hbar} V(\mathbf{r},t)\right] |\Psi_n(t)\rangle + O(\Delta t^3) \quad (\Delta t \rightarrow 0) \quad (1.03)$$

No termo da energia cinética, o operador $P^2(\mathbf{r}) = -\hbar^2 \nabla^2$ é o responsável pelas derivadas de segunda ordem no expoente. Em princípio, poderíamos expandí-lo até uma certa ordem, porém esta expansão não seria um operador unitário, o que tornaria necessária uma normalização da função após cada Δt . Deste modo, permutamos o operador energia cinética por outro unitário (Apêndice B), mas que tenha a mesma expansão até ordens de Δt^2 , já que podemos desprezar qualquer termo de ordem superior a Δt^2 . O operador escolhido foi:

$$\exp\left(\frac{-i\Delta t}{2\hbar m_n^*} P(\mathbf{r})^2\right) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{-i\Delta t}{2\hbar m_n^*} P(\mathbf{r})^2\right)^n \cong \left[1 + \frac{i\Delta t}{2\hbar m_n^*} P(\mathbf{r})^2\right]^{-1} \left[1 - \frac{i\Delta t}{2\hbar m_n^*} P(\mathbf{r})^2\right] + O(\Delta t^3) \quad (1.04)$$

Com esta aproximação, para se achar a forma da função de onda no instante $t+\Delta t$, conhecendo-se sua forma em t , é preciso efetuar a seguinte sequência de aplicação dos operadores energia potencial e cinética em $|\Psi_n(t)\rangle$:

$$|\Psi_n(t + \Delta t)\rangle = \exp\left[\frac{-i\Delta t}{2\hbar} V(\mathbf{r}, t)\right] \left[1 + \frac{i\Delta t}{4\hbar m_n^*} P^2(\mathbf{r})\right]^{-1} \left[1 - \frac{i\Delta t}{4\hbar m_n^*} P^2(\mathbf{r})\right] \exp\left[\frac{-i\Delta t}{2\hbar} V(\mathbf{r}, t)\right] |\Psi_n(t)\rangle + \underbrace{O(\Delta t^3)}_{\text{desprezados}} \quad (1.05)$$

Esta sequência de operações pode ser subdividida em três etapas. Na primeira basta multiplicar a exponencial do potencial pela função de onda no instante t , conhecida anteriormente,

$$|\Phi_n(t)\rangle = \exp[-i\Delta t V(\mathbf{r}, t)/2\hbar] \cdot |\Psi_n(t)\rangle \quad (1.06)$$

onde chamamos por $|\Phi_n(t)\rangle$ a função resultante desta aplicação. No passo seguinte, as derivadas parciais de $P^2(\mathbf{r})$ na discretização efetuada envolvem, para qualquer ponto x_j , os termos vizinhos x_{j-1} e x_{j+1} . Isto traz a necessidade da utilização do algoritmo de Thomas para matrizes tridiagonais (Apêndice C) em sua resolução,

$$\underbrace{\left[1 + \frac{i\Delta t}{4\hbar m_n^*} P(\mathbf{r})^2\right]}_{\text{parte a ser determinada}} |\varphi_n(t)\rangle = \underbrace{\left[1 - \frac{i\Delta t}{4\hbar m_n^*} P(\mathbf{r})^2\right]}_{\text{parte conhecida}} |\Phi_n(t)\rangle \quad (1.07)$$

onde $|\varphi_n(t)\rangle$ é a função a ser determinada nesta etapa. De posse deste resultado, a forma da função de onda no tempo $t+\Delta t$ será determinada através da multiplicação da exponencial do potencial por $|\varphi_n(t)\rangle$:

$$|\Psi_n(t+\Delta t)\rangle = \exp[-i\Delta t V(\mathbf{r}, t)/2\hbar] \cdot |\varphi_n(t)\rangle \quad (1.08)$$

Uma vez determinado $|\Psi_n(t+\Delta t)\rangle$, calculamos as energias ε_n e valores esperados de qualquer grandeza $\langle \mathbf{G}(t) \rangle$ através da resolução numérica das integrais

$$\varepsilon_n = \langle \Psi_n(t+\Delta t) | \mathbf{H} | \Psi_n(t+\Delta t) \rangle \text{ e } \langle \mathbf{G}(t) \rangle = \langle \Psi_n(t+\Delta t) | \mathbf{G}(t) | \Psi_n(t+\Delta t) \rangle \quad (1.09)$$

Se o intervalo total de evolução for da ordem de muitos fentosegundos, devemos subdividi-lo em diversos subintervalos menores, acarretando na formação de um looping temporal. Para cada passo temporal, é necessário repetir o procedimento até aqui executado para garantir a integridade dos resultados a serem obtidos.

No caso de evoluir uma função que não é auto-estado do sistema, haverá uma oscilação dos valores esperados $\langle \mathbf{G}(t) \rangle$ da referida função. Isto é comprovado pela expansão destas funções de onda $|\Psi_n(t)\rangle$ na base de auto-estados $|\chi_i\rangle$ do sistema,

$$\langle \mathbf{G}(t) \rangle = \langle \Psi_n(t) | \mathbf{G}(t) | \Psi_n(t) \rangle = \sum_{i,j=1}^n c_i^* c_j \exp\left(\frac{-i\Delta t(\varepsilon_i - \varepsilon_j)}{\hbar}\right) \langle \chi_i | \mathbf{G}(t) | \chi_j \rangle \quad (1.10)$$

onde ε_i e ε_j são as auto-energias do i e j -ésimo estado respectivamente. Estas oscilações não existirão para a propagação temporal dos auto-estados do sistema.

1.2 - TEMPO IMAGINÁRIO E SUAS PROPRIEDADES

Além da evolução temporal, através do método do Split-Operator calcula-se também as auto-funções, auto-energias e auto-valores esperados. Para isto é necessário trocar t por $-i\tau$ na Eq. (1.01), de forma a transformar a equação de Schrödinger em outra análoga à equação da difusão de calor. Uma vez que se faça as mesmas suposições da evolução em tempo real, para se achar a forma da função de onda no instante $\tau + \Delta\tau$, conhecendo-se sua forma em τ , é preciso efetuar a seguinte sequência de aplicação dos operadores energia potencial e cinética em $|\Psi_n(\tau)\rangle$:

$$|\Psi_n(\tau + \Delta\tau)\rangle = \exp\left[\frac{\Delta\tau}{2\hbar} V(\mathbf{r}, \tau)\right] \left[1 - \frac{\Delta\tau}{4\hbar m_{\eta}} \mathbf{P}^2(\mathbf{r})\right]^{-1} \left[1 + \frac{\Delta\tau}{4\hbar m_{\eta}} \mathbf{P}^2(\mathbf{r})\right] \exp\left[\frac{\Delta\tau}{2\hbar} V(\mathbf{r}, \tau)\right] |\Psi_n(\tau)\rangle + \underbrace{O(\Delta\tau^3)}_{\text{desprezados}} \quad (1.11)$$

Tal mudança faz com os operadores não sejam mais unitários, havendo a necessidade da utilização do processo de Ortonormalização de Gram-Schmidt^[47] a cada passo de tempo.

$$|\Psi_n(\tau + \Delta\tau)\rangle = |\Psi_n(\tau + \Delta\tau)\rangle - \sum_{R=1}^{n-1} \langle \Psi_R(\tau + \Delta\tau) | \Psi_n(\tau + \Delta\tau) \rangle |\Psi_R(\tau + \Delta\tau)\rangle \quad (1.12)$$

Através da expansão da função $|\Psi_n(\tau)\rangle$ na base ortonormal dos auto-estados $|\chi_n\rangle$ do sistema, encontramos a seguinte expansão:

$$|\Psi_n(\tau)\rangle = \sum_{j=1}^n c_j \exp(-\tau \varepsilon_j / \hbar) |\chi_j\rangle / \sqrt{\sum_{i=1}^n |c_i|^2 \exp(-2\tau \varepsilon_i / \hbar)} \quad (1.13)$$

onde $\varepsilon_0 < \varepsilon_1 < \varepsilon_2 \dots$ são as auto-energias do sistema. Ela será útil nas investigações das principais propriedades da propagação em tempo imaginário, a saber:

a) Qualquer que seja a forma proposta para a função de onda inicial, esta função tenderá ao estado fundamental do sistema quando o tempo imaginário τ tender ao infinito (computacionalmente, um número grande de interações).

Através da expansão dos somatórios na Eq. (1.13), colocando-se em evidência $c_0 \cdot \exp(-\tau \cdot \varepsilon_0 / \hbar)$, que é o primeiro termo nesta expansão, verificamos que:

$$|\Psi_n(\tau)\rangle = \frac{\frac{c_0}{|c_0|} |\chi_0\rangle + \frac{c_1}{|c_0|} \exp\left(\frac{-\tau \cdot (\varepsilon_1 - \varepsilon_0)}{\hbar}\right) |\chi_1\rangle + \sum_{j=2}^n \frac{c_j}{|c_0|} \exp\left(\frac{-\tau \cdot (\varepsilon_j - \varepsilon_0)}{\hbar}\right) |\chi_j\rangle}{\sqrt{1 + \frac{|c_1|^2}{|c_0|^2} \exp\left(\frac{-2\tau \cdot (\varepsilon_1 - \varepsilon_0)}{\hbar}\right) + \sum_{i=2}^n \frac{|c_i|^2}{|c_0|^2} \exp\left(\frac{-2\tau \cdot (\varepsilon_i - \varepsilon_0)}{\hbar}\right)}} \quad (1.14)$$

Quando τ tender ao infinito, todas as exponenciais vão a zero. Assim, $|\Psi_n(\tau \rightarrow \infty)\rangle = c_0/|c_0| \cdot |\chi_0\rangle$ que é o auto-estado fundamental.

Fig 1.1 - Na propagação em tempo imaginário, o módulo da função de onda inicial retangular se transforma no estado fundamental do sistema, após decorrido um certo tempo. Pela sequência acima, mostramos a modificação em sua forma no intervalo de zero a $750 \cdot 10^{-15}$ segundos, quando então assumiu sua forma definitiva.

b) Quando $\tau \rightarrow \infty$, todos os auto-estados do sistema são conseguidos se for incluída a ortonormalização de Gram-Schmidt na evolução em tempo imaginário.

Sejam $|\Psi_n(\tau)\rangle$ e $|\Psi_m(\tau)\rangle$ duas funções distintas, de expansões idênticas à Eq. (1.13) mas com coeficientes a_j e c_j , respectivamente. O *overlap* destas funções é da forma:

$$\langle \Psi_n(\tau) | \Psi_m(\tau) \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\frac{a_0 c_0}{|a_0||c_0|} + \frac{a_1 c_1}{|a_0||c_0|} \exp\left(\frac{-2\tau \cdot (\varepsilon_1 - \varepsilon_0)}{\hbar}\right) + \sum_{j=2}^n \frac{a_j c_j}{|a_0||c_0|} \exp\left(\frac{-2\tau \cdot (\varepsilon_j - \varepsilon_0)}{\hbar}\right)}{\sqrt{\left(1 + \sum_{i=1}^n \frac{|c_i|^2}{|c_0|^2} \exp\left(\frac{-2\tau \cdot (\varepsilon_i - \varepsilon_0)}{\hbar}\right)\right) \left(1 + \sum_{i=1}^n \frac{|a_i|^2}{|a_0|^2} \exp\left(\frac{-2\tau \cdot (\varepsilon_i - \varepsilon_0)}{\hbar}\right)\right)}} = \frac{a_0}{|a_0|} \cdot \frac{c_0}{|c_0|} = 0 \quad (1.15)$$

Sendo $c_0/|c_0| \neq 0$, então $a_0/|a_0|$ é igual a zero. Com isto desaparece o termo a_0 nos somatórios e a expansão de $|\Psi_m(\tau)\rangle$ deverá ser iniciada pelo coeficiente a_1 , referente ao primeiro estado excitado do sistema,

$$|\Psi_m(\tau)\rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\frac{a_1}{|a_1|} |\chi_1\rangle + \frac{a_2}{|a_1|} \exp\left(\frac{-\tau \cdot (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\hbar}\right) |\chi_2\rangle + \sum_{j=3}^n \frac{a_j}{|a_1|} \exp\left(\frac{-\tau \cdot (\varepsilon_j - \varepsilon_1)}{\hbar}\right) |\chi_j\rangle}{\sqrt{1 + \frac{|a_2|^2}{|a_1|^2} \exp\left(\frac{-2\tau \cdot (\varepsilon_2 - \varepsilon_1)}{\hbar}\right) + \sum_{i=3}^n \frac{|a_i|^2}{|a_1|^2} \exp\left(\frac{-2\tau \cdot (\varepsilon_i - \varepsilon_1)}{\hbar}\right)}} = \frac{a_1}{|a_1|} |\chi_1\rangle \quad (1.16)$$

Qualquer outra função que ficar ortogonal à estas duas tenderá ao segundo estado excitado, se ficar ortogonal à estas três, ao terceiro estado excitado, e assim por diante.

c) No limite $\tau \rightarrow \infty$, a função de onda de qualquer nível considerado não mais se modifica.

Vemos pela Fig. 1.1 que o módulo da função de onda de um sistema muda conforme o tempo passa. Esta modificação porém, torna-se menor à medida que o tempo de propagação aumenta. Após certo tempo, esta modificação não mais ocorre. Isto pode ser comprovado pelo cálculo do *overlap* de uma função de onda nos instantes τ e $\tau + \delta$:

$$\langle \Psi_n(\tau) | \Psi_n(\tau + \delta) \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1 + \sum_{j=1}^n \frac{a_j c_j}{|a_0||c_0|} \exp\left(\frac{-(2\tau + \delta) \cdot \varepsilon_j}{\hbar}\right)}{\sqrt{1 + \sum_{i,q=1}^n \left(\frac{a_i c_q}{|a_0||c_0|}\right)^2 \exp\left(\frac{-2[\tau \cdot (\varepsilon_i + \varepsilon_q - 2\varepsilon_0) + \delta \varepsilon_q]}{\hbar}\right)}} = 1 \quad (1.17)$$

d) Os valores esperados e as energias iniciais tendem aos valores esperados e às auto-energias de suas respectivas auto-funções.

No limite $\tau \rightarrow \infty$, obtemos os auto-valores esperados do sistema através do cálculo de $\langle \mathbf{G}(\tau) \rangle$:

$$\langle \mathbf{G}(\tau) \rangle = \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{\langle \chi_0 | \mathbf{G}(\tau) | \chi_0 \rangle + \sum_{j=1}^n \frac{a_j c_j}{|a_0||c_0|} \exp\left(\frac{-(2\tau + \delta) \cdot \varepsilon_j}{\hbar}\right) \langle \chi_j | \mathbf{G}(\tau) | \chi_j \rangle}{\sqrt{1 + \sum_{i,q=1}^n \left(\frac{a_i c_q}{|a_0||c_0|}\right)^2 \exp\left(\frac{-2[\tau \cdot (\varepsilon_i + \varepsilon_q - 2\varepsilon_0) + \delta \varepsilon_q]}{\hbar}\right)}} = \langle \chi_0 | \mathbf{G}(\tau) | \chi_0 \rangle \quad (1.18)$$

Na Fig. 1.2, mostramos a convergência das energias e valores esperados da posição e potencial para os três primeiros auto-estados do buraco pesado de uma super-rede de 7 poços quânticos.

Fig. 1.2 - a): No tempo imaginário as funções de onda iniciais se modificam até atingirem a forma do auto-estado designado. A partir daí, elas adquirem um caráter permanente. b): valores esperados da posição e potencial dos três primeiros auto-estados de uma super-rede de 7 poços quântico tendem a uma constante, quando propagados em tempo imaginário. O referencial da energia foi colocado no topo da banda de condução.

1.3 - SUMÁRIO DO CAPÍTULO 1

Neste capítulo descrevemos o método do Split-Operator, técnica computacional escolhida nas investigações a serem feitas nos capítulos seguintes. Ela apresenta boa estabilidade e rápida convergência, podendo ser aplicado a qualquer potencial não divergente. As principais conclusões são as seguintes:

- Através da propagação em tempo real, podemos estudar transientes da ordem de femtosegundos (10^{-15} segundos), além de modificações na forma de qualquer função investigada. No caso de se evoluir uma função que não é auto-estado do sistema, haverá uma oscilação de seus valores esperados. Estas oscilações não existirão para a propagação temporal dos auto-estados do sistema.
- Na troca do tempo t por $-i\tau$, devemos incluir o Gram-Schmidt pela necessidade de se conservar a norma da função de onda, uma vez que o tempo imaginário torna o Split-Operator não unitário.
- As seguintes propriedades na propagação em tempo imaginário são:

- Qualquer função de onda tende ao estado fundamental do sistema considerado após um número muito grande de interações ($\tau \rightarrow \infty$), independente de sua forma inicial.
- No limite $\tau \rightarrow \infty$, todos os estados do sistema podem ser conseguidos se for incluída a Ortonormalização de Gram-Schmidt na evolução em tempo imaginário das funções de onda.
- Após um número muito grande de interações, a função de onda de qualquer nível considerado não mais se modifica.
- Os valores esperados e as energias iniciais tendem aos valores esperados e às auto-energias de suas respectivas auto-funções.

CAPÍTULO 2

SUPER-REDES NÃO DOPADAS

A estrutura eletrônica de uma super-rede consiste em mini-bandas de energia originadas por interações entre auto-estados de poços quânticos. Esta similaridade com as bandas de energia de cristais convencionais e a possibilidade de imitá-las sob condições controladas, faz das super-redes instrumentos para o estudo de propriedades de sólidos. A largura das mini-bandas (diferença da energia do estado fundamental e do último estado excitado) dependerá das dimensões dos poços e barreiras, além do tipo de portador considerado. Na hipótese de acoplamento fraco, as mini-bandas serão estreitas^[48,49], conforme esquematizado na Fig 2.1.

Fig 2.1 - Uma super-rede se constitui numa sequência periódica de poços e barreiras acoplados entre si. A largura da mini-banda depende do grau de acoplamento dos auto-estados. Se este acoplamento for forte, as bandas são largas, caso contrário, as mini-bandas serão estreitas.

Com o objetivo de estudar o comportamento dos auto-estados em função do número de poços de uma super-rede finita, dividiremos este capítulo da seguinte forma: na seção 2.1, investigaremos as mudanças da forma das auto-funções em função do número de poços, na ausência de campos externos. Na seção 2.2 analisaremos as variações das auto-energias, valores esperados da posição e desvio padrão em função do número de poços. Na seção 2.3, calcularemos a separação média dos níveis de energia e a largura das mini-bandas para cada portador, além do limite assintótico para a super-rede infinita. A última seção será reservada para as conclusões do capítulo.

2.1 - AUTO-FUNÇÕES E NÚMERO DE POÇOS DA SUPER-REDE

Para uma sequência finita de $2N+1$ poços quânticos idênticos de largura L , separados por barreiras de espessura h , a energia potencial $V(x)$ pode ser escrita como:

$$V_{ext}(x) = \begin{cases} V_0 \cdot \sum_{j=-N}^N \mathcal{R}(x - jd) & \text{com } \mathcal{R}(x - jd) = \begin{cases} 0 & |x - jd| \leq L/2 \\ 1 & |x - jd - d/2| \leq h/2 \end{cases} \\ 0 & \text{para } |x| \geq nd + L/2 \end{cases} \quad (2.01)$$

a) Elétrons da Banda de Condução

c) Buracos Pesados da Banda de Valência

Fig 2.3 - Mini-Bandas de energia para elétrons e buracos pesados de uma super-rede de $\text{Al}_{0.20}\text{Ga}_{0.80}\text{As}/\text{GaAs}$ com 3,5, 7 e 9 poços de 40 Å cada um, separados por barreiras de 15 Å de espessura. Pelo fato da massa efetiva dos buracos pesados ser maior do que a dos elétrons, suas mini-bandas são mais estreitas.

Pela Fig. 2.2, constatamos que o número de auto-estados aumenta com o número de poços do sistema, onde cada poço contribuiu com uma auto-função. O acoplamento entre os poços fazem os níveis “splitarem” e as funções de onda se distribuírem ao longo de toda a super-rede. Apesar do aumento de níveis, a largura de *band-offset* da heteroestrutura permanece inalterada em função do número de poços. Isto faz com que os auto-estados diminuam a separação média de energia entre níveis e os auto-estados fiquem cada vez mais próximos uns dos outros.

2.2 - NÚMERO DE POÇOS E LARGURA DA MINI-BANDA

Nesta seção investigaremos as auto-energias da super-rede na ausência de campos externos. Para obter uma expressão que nos forneça uma idéia sobre o comportamento das auto-energias em função do número de poços, subdividiremos o Hamiltoniano total na seguinte forma:

- $H^0 = \frac{\mathbf{P}^2(\mathbf{x})}{2m_n^*} + V_0 \cdot \mathcal{R}(x)$: Hamiltoniano de um poço isolado,
- $\Delta U = V_0 \cdot \sum_{\substack{L=-N \\ L \neq 0}}^N \mathcal{R}(x - Ld)$: acoplamento entre poços,

Consequentemente, a equação de Schrödinger independente do tempo fica $(H^0 + \Delta U)|\Psi_n\rangle = \varepsilon_n |\Psi_n\rangle$, onde ε_n e $|\Psi_n\rangle$ representam a auto-energia e auto-função da super-rede para o n-ésimo estado. Sendo $2N+1$ o número total de poços do sistema, onde cada poço contém apenas um auto-estado $|\varpi\rangle$ quando considerado isolado, a auto-função $|\Psi_n\rangle$ da super-rede pode ser expressa por teorema de Bloch, dada pela expressão:

$$|\Psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N+1}} \sum_{q=-N}^N \exp(ikqd) \varpi(x - qd) \quad (2.02)$$

O somatório em q indica o número de períodos de repetição do potencial ($d=L+h$) a partir do centro do sistema. Sua respectiva auto-energia $\varepsilon_n = \langle \Psi_n | H | \Psi_n \rangle$ é dada pela relação (dedução no apêndice D):

$$\varepsilon_n(k) = \varepsilon_n^0 + \int_{-\infty}^{\infty} \varpi(x) \cdot \Delta U \cdot \varpi(x) \cdot dx + 2 \sum_{q=-N}^N \cos(qkd) \int_{-\infty}^{\infty} \varpi(x) \cdot \Delta U \cdot \varpi(x - qd) \cdot dx \quad (2.03)$$

onde ε_n^0 representa a auto-energia do poço isolado.

As energias máxima $\varepsilon_{\max}$ e mínima $\varepsilon_{\min}$ acontecerão quando $\cos(qkd) = \pm 1$, respectivamente e a largura da mini-banda Δ_{2N+1} será igual à diferença destas duas energias:

$$\Delta_{2N+1} = \varepsilon_{\max} - \varepsilon_{\min} = 4 \sum_{q=-N}^N \int \varpi(x) \cdot \Delta U \cdot \varpi(x - qd) \cdot dx \quad (2.04)$$

Podemos comparar a expressão da largura da mini-banda Δ_{2N+1} com outra contendo $2Z+1$ poços ($Z > N$). Como resultado, temos que:

$$\Delta_{2Z+1} = \Delta_{2N+1} + 8 \sum_{q=N+1}^Z \langle \varpi(x) | \Delta U | \varpi(x - qd) \rangle \quad (2.05)$$

e a largura da mini-banda tenderá a uma constante pois o somatório contém apenas termos relativos às interações do poço central do sistema em relação aos poços situados próximos das extremidades, os quais estarão cada vez mais distanciados entre si, com o aumento do número de poços da super-rede. O cálculo da somatória envolve um número enorme de termos e só é possível ser feita numericamente. Verificando o comportamento previsto com o Split-Operator, efetuando o cálculo das auto-funções, temos os gráficos da Fig. 2.3.

Como a largura da mini-banda em função do número de poços tende a uma constante, então a separação média dos níveis de energia $S_{\text{med}}(n) = \Delta_n/n$ decresce com o aumento do número de auto-estados do sistema.

Largura das mini-bandas e separação média dos níveis de energia dos elétrons, buracos leves e pesados em função do número de poços de uma super-rede finita não dopada

Fig 2.3 - Ao aumentar o número de poços, a largura das mini-bandas e a separação média dos níveis de energia tendem a uma constante. Na super-redes de 9 poços, não apresenta grandes diferenças da de 7 poços.

Tabela 2.1 - separação média e largura das mini-bandas de portadores com o aumento do número de poços.

	elétrons	elétrons	buracos leves	buracos leves	buracos pesados	buracos pesados
numero de poços	largura da mini-banda (meV)	separação média dos níveis (meV)	largura da mini-banda (meV)	separação média dos níveis (meV)	largura da mini-banda (meV)	separação média dos níveis (meV)
3	70.99	23.66	56.92	8.97	7.80	2.60
5	88.96	17.79	64.60	8.92	9.56	1.91
7	96.11	13.73	71.86	8.83	10.20	1.46
9	99.75	11.08	74.00	8.44	10.50	1.17

A diferença de largura das mini-banda aumenta em torno de 3 % quando passamos de uma super-rede de 7 para 9 poços. Este aumento percentual deve diminuir ainda mais conforme o número de poços aumenta, de forma que a aproximação de um sistema contendo 7 poços por uma super-rede infinita torna-se razoável para muitas aplicações.

2.3 - AUTO-ENERGIAS E NÚMERO DE POÇOS DA SUPER-REDE

O número de auto-estados aumenta com o crescimento do número de poços. A largura da mini-banda tende a uma constante e com isto a separação entre os níveis diminui. A inclusão de novos auto-estados faz com que as energias dos antigos níveis se modifiquem, convergindo ao valor da auto-energia do estado fundamental. Comportamento semelhante se verifica no valor esperado do potencial da heteroestrutura $\langle V \rangle$, que indica o quanto se localiza a função de onda dentro dos poços, conforme mostrado na Fig. 2.4:

Fig. 2.4 - Pelo aumento do número de poços da super-rede, verificamos que as auto-energias (gráficos à esquerda) e os valores esperados do potencial (gráficos à direita) tendem ao estado fundamental. O referencial da energia é estabelecido na banda de condução do $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}$.

O desvio padrão da posição $\sigma = (\langle X \rangle^2 - \langle X^2 \rangle)^{1/2}$ indica o grau de localização dos auto-estados. Esta grandeza deve aumentar com o número de poços pois o sistema fica maior e as auto-funções mais deslocalizadas, conforme é verificado na Fig. 2.5

desvio padrão da posição dos elétrons em função do número de poços da super-rede

desvio padrão da posição dos buracos leves e pesados em função do número de poços da super-rede

Fig. 2.5 - O desvio padrão aumenta à medida que aumentamos o número de poços e consequentemente o tamanho do sistema. Como esta grandeza indica quão localizado está um auto-estado, verifica-se que este valor independe do estado considerado, salvo o primeiro e último estado que delimitam a mini-banda de energia.

Foi observado uma menor deslocalização dos auto-estados que delimitam a mini-banda de energia. Isto ocorre por estes estados serem menos interagentes, de forma que seus desvios padrão sejam diferentes dos demais.

2.4 - SUMÁRIO DO CAPÍTULO 2

Neste capítulo, efetuamos um estudo comparativo de sequências de três, cinco, sete e nove poços idênticos acoplados entre si, nas bandas de condução e valência. Isto foi feito para investigar as mudanças nas propriedades dos auto-estados em função do número de poços do sistema. Os principais resultados obtidas pelo Split-Operator foram os seguintes:

- Quando existe um acoplamento entre os poços, as funções de onda se espalham por todo o sistema formando mini-bandas. A largura das mini-bandas depende da geometria do sistema, do número de poços e do tipo de portador considerado.

- As auto-energias tendem ao valor da energia do estado fundamental com o aumento do número de poços. Os valores esperados do potencial da heteroestrutura $\langle V(x) \rangle$ apresentam comportamento semelhante.
- A largura Δ da mini-banda tende a se estabilizar com o aumento do número de poços do sistema, ao passo que a separação entre os níveis diminui. Através da comparação dos valores encontrados para a largura da mini-banda entre os portadores, verificamos que $\Delta_{\text{eletrons}} > \Delta_{\text{buracos leves}} > \Delta_{\text{buracos pesados}}$.
- O comportamento dos auto-estados tende a uma constante com o aumento do número de poços do sistema. Em nosso sistema, a diferença entre os valores das auto-energias de uma super-rede de 7 e 9 poços não é superior a 3%.
- O desvio padrão cresce com o aumento do número de poços em função da distribuição das auto-funções ao longo do sistema. O valor deste desvio é constante para todos os estados da mini-banda, exceto para os estados que a delimitam. Neles o acoplamento é menor, ocorrendo uma maior localização dos auto-estados.

CAPÍTULO 3

ESTADOS LOCALIZADOS

Uma maneira de introduzir estados localizados, com energias diferentes das encontradas nas mini-bandas (vide Fig 3.1). é tornar a largura de um dos poços diferente dos demais. Estes estados se restringem às proximidades do poço, que possui um poder de confinamento diferente dos outros, produzindo uma situação análoga à proposta em 1932 por Tamm no estudo de estados de superfície em sólidos.

ruptura da simetria de translação pelo alargamento do poço localizado numa das extremidades do sistema

Fig 3.1 - Estados de superfície numa super-rede podem ser conseguidos através do alargamento de seu último poço.

O objetivo deste capítulo será estudar estes estados localizados, também denominados estados de Tamm. Na seção inicial investigaremos as mudanças na forma dos estados de Tamm em função do comprimento do poço mais largo (80, 120, 160 e 200 Å). As auto-energias, valores esperados da posição e potencial serão estudados na seção subsequente. Na seção 3.3, analisaremos as diferenças de energia entre os estados localizados e os da mini-banda. Na seção 3.4 verificaremos o comportamento dos auto-estados em função da posição do poço. Nesta seção, o valor para o poço mais largo será de 60 Å para produzir um estado localizado por portador. No final serão efetuadas as conclusões deste capítulo.

3.1 - AUTO-FUNÇÕES DOS ESTADOS DE TAMM I COMPRIMENTO DO POÇO LARGO

Ao contrário dos estados das mini-bandas que são bastante deslocalizados na heteroestrutura, os estados de Tamm situam-se quase que completamente no poço de comprimento diferente dos demais. Isto pode ser verificado na Fig. 3.2, que retrata uma simulação feita para elétrons e buracos de uma super-rede de 7 poços quânticos, onde o comprimento do último poço é igual ao dobro, triplo, quádruplo e quádruplo do comprimento L dos outros poços (L=40 Å).

électrons

buracos pesados

Fig 3.2 - Quanto maior é o tamanho do poço mais largo, mais aparecem estados localizados. Eles não partipam da minibanda por possuírem energias mais baixas ou se situarem exclusivamente no poço mais largo.

Conforme a largura do poço da extremidade aumenta, as auto-funções se aproximam do fundo do *band-offset* para a banda de condução e do topo do *band-offset* para o caso da banda de valência. A forma das funções de onda dos auto-estados de Tamm ficam mais “suaves” e mais localizadas nas vizinhanças deste poço. As energias dos estados de Tamm diminuem e a diferença entre o estado fundamental da mini-banda e o de Tamm aumenta.

3.2 - AUTO-ENERGIAS DOS ESTADOS DE TAMM E COMPRIMENTO DO POÇO DA EXTREMIDADE DA SUPER-REDE

Quanto maior for o comprimento do poço da extremidade da super-rede, menor é o valor das energias dos estados de Tamm. Este decaimento tende a um valor constante assim que estas auto-energias alcancem as proximidades do fundo dos *band-offsets*. Este comportamento também é obedecido pelo valor esperado do potencial $\langle V(x) \rangle$, conforme Fig. 3.3.

a) auto-energias dos estados de Tamm em função do comprimento do poço da extremidade
banda de condução banda de valência

b) $\langle V(x) \rangle$ para os estados de Tamm em função do comprimento do poço da extremidade
banda de condução banda de valência

Fig. 3.3 - a) auto-energias e b) valores esperados do potencial dos estados de Tamm para as bandas de condução e valência em função do comprimento do poço mais largo.

Tornando o poço da extremidade mais largo, as funções de onda dos estados de Tamm ficam mais distribuídas por todo o comprimento deste poço. Consequentemente,

este aumento de largura provoca um aumento no valor esperado da posição $\langle X \rangle$ e seu respectivo desvio padrão σ , como é visto na Fig. 3.4.

$\langle X \rangle$ para os estados de Tamm em função do comprimento do poço da extremidade elétrons

buracos leves

buracos pesados

desvio padrão da posição para os estados de Tamm em função do comprimento do poço mais largo

banda de condução

banda de valência

Fig. 3.4 - valores esperados da posição e desvio padrão dos estados de Tamm numa super-rede de 7 poços em função do comprimento do poço mais largo para as bandas de condução e valência.

Com o aumento do comprimento do poço da extremidade, as auto-energias tendem às energias de um poço infinito $E_n = (n^2 \pi^2 \hbar^2 / 2m^* L^2)$. Esta tendência foi verificada na Fig. 3.5, que compara a energia dos estados de Tamm com as energias do poço infinito, para os elétrons e buracos.

Fig. 3.5 - Comparação dos valores de energia dos elétrons e buracos dos estados de Tamm e poço infinito. Observamos uma convergência de valores destas duas grandezas.

3.3 - ESTADOS DE TAMM E MÍNIMOS E MÁXIMOS DE ENERGIA DA MINI-BANDA

Um indicador da interação entre os estados de Tamm e os da mini-banda pode ser conseguido através da diferença de energia entre estes auto-estados e os níveis mínimos e máximos de energias das mini-bandas. Quanto maior for esta diferença, menores as interações existentes. Estas interações diminuem com o aumento do comprimento do poço, tendendo a uma constante conforme os estados de Tamm alcancem as proximidades do fundo do poço. Adotaremos a seguinte convenção:

- $\epsilon_{Tc}(i)$ e $\epsilon_{Tv}(i)$ são as auto-energias do i -ésimo estado de Tamm nas bandas de condução e valência;
- ϵ_{cmax} , ϵ_{vmax} , ϵ_{cmin} e ϵ_{vmin} os valores máximos e mínimos das energias das bandas de condução e valência;
- $\Delta\epsilon_{cmax}$, $\Delta\epsilon_{cmin}$, $\Delta\epsilon_{vmin}$ e $\Delta\epsilon_{vmax}$ representam o módulo das diferenças entre as energias dos estados de Tamm e as energias máximas e mínimas das mini-bandas;
- $\Delta\epsilon_c$ e $\Delta\epsilon_v$ denotam a diferença de energia entre os estados de Tamm e o meio da mini-banda.

de modo que:

$$\begin{cases} \Delta\epsilon_{cmin}(i) = |\epsilon_{cmin} - \epsilon_{Tc}(i)| \\ \Delta\epsilon_{cmax}(i) = |\epsilon_{cmax} - \epsilon_{Tc}(i)| \end{cases}, \quad \begin{cases} \Delta\epsilon_{vmin}(i) = |\epsilon_{Tv}(i) - \epsilon_{vmin}| \\ \Delta\epsilon_{vmax}(i) = |\epsilon_{Tv}(i) - \epsilon_{vmax}| \end{cases}, \quad \begin{cases} \Delta\epsilon_c = |\Delta\epsilon_{cmin} + \Delta\epsilon_{cmax}|/2 \\ \Delta\epsilon_v = |\Delta\epsilon_{vmin} + \Delta\epsilon_{vmax}|/2 \end{cases} \quad (3.01)$$

Os gráficos destas grandezas estão mostrados na Fig. 3.6, convergindo a um valor constante com o aumento do número de poços. Isto ocorre pois uma vez que o estado localizado se aproxime do fundo do *band-offset*, sua energia quase não varia.

Gráficos de DE_{cmin} , DE_{cmin} e ME_c para a banda de condução e DE_{vmin} , DE_{vmax} , e ME_v para a banda de valência

Fig. 3.6 - Diferença de energia entre o primeiro estado de Tamm e os níveis mínimos e máximos de energias das mini-bandas de condução DE_{cmin} , DE_{cmax} . Também está mostrado a ME_c , definida como a diferença de energia entre o primeiro estado de Tamm e o meio da mini-banda.

Tabela 3.1 - Relações entre DE_{cmin} , DE_{cmax} e ME_c para os elétrons da Banda de Condução e Buracos Leves e Pesados da Banda de Valência, quando variamos o poço mais largo em 2, 3, 4 e até 5 vezes o tamanho de um poço comum de 40 Å de comprimento, que forma a super-rede de $Al_{0.20}Ga_{0.80}As/GaAs$.

Poço Largo/Poço comum	Elétrons			Buracos Leves			Buracos Pesados		
	DE_{cmin} (meV)	DE_{cmax} (meV)	ME_c (meV)	DE_{vmin} (meV)	DE_{vmax} (meV)	ME_v (meV)	DE_{vmin} (meV)	DE_{vmax} (meV)	ME_v (meV)
2	42.01	134.39	88.20	18.68	97.00	57.84	19.27	29.21	24.24
3	75.74	159.56	112.97	34.11	110.00	72.05	25.22	35.16	30.19
4	76.91	170.17	123.54	41.01	117.14	79.07	27.61	37.56	32.59
5	82.30	172.15	127.22	44.59	118.69	81.64	28.76	38.70	33.73

3.4 - MUDANÇA DE POSIÇÃO DO POÇO MAIS LARGO

Fixando o tamanho do poço mais largo em uma vez e meia o comprimento dos demais, investigaremos o comportamento das auto-funções quando este poço mudar de lugar, transladando até o meio do sistema. Conforme o poço vai penetrando no interior da super-rede, a forma das auto-funções da mini-banda se alteram (vide Fig. 3.7). O poço mais largo efetua uma “divisão” das auto-funções do sistema pois aquelas auto-funções que apresentarem uma grande variação do valor de seu módulo antes do poço aparecer permanecem constantes depois de passar o poço e vice-versa.

Esta “divisão”, causada pelo desacoplamento dos poços que se situam antes do poço largo daqueles que se situam após é verificada tanto para os elétrons na banda de condução quanto para os buracos leves e pesados situados na banda de valência.

Elétrons da Banda de Condução

a) O poço mais largo está na extremidade

b) O poço mais largo é o penúltimo

c) O poço mais largo é o ante-penúltimo

d) O poço mais largo está no meio do sistema

Buracos Pesados da Banda de Valência

a) O poço mais largo está na extremidade

b) O poço mais largo é o penúltimo

c) O poço mais largo é o ante-penúltimo

d) O poço mais largo está no meio do sistema

Fig 3.7 - No sistema da figura, o poço mais largo possui um comprimento de 60 Å enquanto que o normal tem 40 Å. A espessura $h = 15$ Å. A altura da barreira é de 330 e 192 meV para as bandas de condução e valência.

De um modo geral, os valores mínimos das energias e desvios padrão da posição ocorrerão quando o poço mais largo se situar no meio da super-rede, quando então existe uma recuperação parcial da simetria de translação do sistema. Isto é verificado na Fig 3.8:

Fig 3.8 - Auto-energias dos estados de Tamm quando o poço mais largo possui um comprimento de 60 Å ao passo que o normal tem 40 Å. Também está mostrado o desvio padrão em função deste mesmo parâmetro.

3.5 - SUMÁRIO DO CAPÍTULO 3

Neste capítulo foram estudados os auto-estados que se formam com a inclusão de um poço cujo poder de confinamento difere dos outros existentes na super-rede. As conclusões que foram obtidas são as seguintes:

- O formato das auto-funções dos estados de Tamm ficam cada vez mais “suaves” conforme cresce a largura do poço. No sistema, verificamos o aparecimento de mais de um estado localizado quando a largura é maior ou igual a 80 Å.
- Na investigação de suas respectivas auto-energias, constatou-se o decaimento dos valores dos estados localizados, que tendem a uma constante à medida em que os estados de Tamm alcançam o fundo da banda.
- O crescimento encontrado para os valores esperados da posição $\langle X \rangle$ e seu respectivo desvio padrão σ é devido ao aumento do comprimento do sistema.
- O grau de interação entre os estados de Tamm e os da mini-banda pode ser conseguido através da diferença de energia entre estes auto-estados e os níveis mínimos e máximos de energias das mini-bandas. Quanto maior for esta diferença, menores as interações existentes. Observamos uma diminuição destas interações com o aumento do comprimento do poço.
- Numa super-rede finita, a posição do poço mais largo modifica a forma dos auto-estados do sistema. Os mínimos da energia e do desvio padrão da posição ocorrem quando o poço mais largo está no meio do sistema.

CAPÍTULO 4

EFEITO STARK EM SUPER-REDES

Uma super-rede é um sistema periódico de poços quânticos acoplados entre si, levando a formação de mini-bandas de energias. Na presença de um campo elétrico aplicado na direção de crescimento da super-rede ocorre um “entortamento” (vide Fig 4.1) das bandas de condução e valência, resultando num menor *overlap* das funções de onda^[50,51,52,53]. Os auto-estados da mini-banda se distribuem sequencialmente ao longo da direção do campo formando uma escada, conhecida como escada Wannier-Stark, em homenagem à G. H. Wannier que previu teoricamente este efeito em 1959. Para campos muito fortes, o potencial do sistema é entortado a tal ponto que os portadores podem escapar do poço (Tunelamento Induzido pelo Campo), após vencerem a barreira existente. O valor do campo necessário para alcançar este regime depende do tipo de portador.

Entortamento dos poços devido à aplicação de um campo elétrico na direção do crescimento da amostra.

Fig 4.1 - super-rede sob a ação de um campo elétrico constante E , orientado no sentido de crescimento da amostra. Quanto maior for seu valor maior será o entortamento do potencial da heteroestrutura, provocando um decréscimo no *overlap* das auto-funções do sistema e o desaparecimento da mini-banda de energia.

O objetivo deste capítulo será estudar a escada Wannier-Stark para os elétrons e buracos numa super-rede de GaAs/Al_{0.2}Ga_{0.8}As. Na primeira seção, investigaremos a forma das auto-funções do sistema para campos elétricos de 30, 60 e 90 kV/cm. Na seguinte, analisaremos as mudanças nas auto-energias, na largura das mini-bandas, separação média entre auto-estados, valores esperados da posição e potencial, além da obtenção do desvio padrão da posição em função do campo. Na seção 4.3, o tunelamento induzido pelo campo será analisado, obtendo-se uma expressão para a probabilidade de tunelamento de um portador. As conclusões estarão no final do capítulo.

4.1 - AUTO-FUNÇÕES EM FUNÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO

Quando um campo elétrico E uniforme é aplicado na direção do eixo de crescimento da super-rede, temos o denominado efeito Stark longitudinal. A forma do potencial $V(x)$ da heteroestrutura se modifica na presença deste campo, passando a ser descrita como:

$$V(x) = \begin{cases} V_0 - qE(Nd + L/2) & x \geq Nd + L/2 \\ \sum_{j=-N}^N V(x - jd) & \text{onde } V(x - jd) = \begin{cases} -qEx & |x - jd| \leq L/2 \\ V_0 - qEx & |x - jd - d/2| \leq h/2 \end{cases} \\ V_0 + qE(Nd + L/2) & x \leq -(Nd + L/2) \end{cases} \quad (4.01)$$

A equação de Schrödinger pode ser significativamente simplificada neste potencial se for adotado uma mudança de variável conveniente. Por este procedimento, trocamos a resolução da equação de Schrödinger pela equação de Airy^[54],

$$\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} |\sigma_n(\xi)\rangle + \xi \cdot |\sigma_n(\xi)\rangle = 0 \quad \text{onde } \xi = \begin{cases} \xi_p = -(2m_p^* qE/\hbar^2)^{1/3} \cdot (x + \varepsilon_n/qE) \\ \xi_b = -(2m_b^* qE/\hbar^2)^{1/3} \cdot (x + (V_0 + \varepsilon_n)/qE) \end{cases} \quad (4.02)$$

sendo a combinação linear das funções de Airy de primeira e segunda espécies $AI(\xi)$ e $BI(\xi)$ a solução analítica das auto-funções do sistema considerado,

$$|\sigma_n(\xi)\rangle = c_0^{(n)} \cdot AI^{(n)}(\xi) + c_1^{(n)} \cdot BI^{(n)}(\xi) \quad (4.03)$$

$$\text{com } \begin{cases} AI^{(n)}(\xi) = 1 - \frac{\xi^3}{2.3} + \frac{\xi^6}{2.3.5.6} - \dots + \frac{(-1)^n \cdot \xi^{3n}}{2.3.5.6.8.9 \dots (3n-1).3n} \\ BI^{(n)}(\xi) = \xi - \frac{\xi^4}{3.4} + \frac{\xi^7}{3.4.6.7} - \dots + \frac{(-1)^n \cdot \xi^{3n+1}}{3.4.6.7.9.10 \dots 3n.(3n+1)} \end{cases}$$

As constantes que aparecem multiplicando estas funções devem ser determinadas pelas condições de contorno do sistema (continuidade das funções de onda, ortonormalização, etc). Este procedimento não será adotado aqui por envolver um número enorme de termos em suas expressões no caso particular da super-rede.

Através das simulações numéricas efetuadas, constatamos que as funções de onda ficam mais localizadas com o aumento do valor do campo elétrico. O grau desta localização é maior nos buracos devido ao valor de sua massa efetiva. Isto pode ser visto na Fig 4.2, onde, para um campo de 30 kV/cm, as funções de onda dos elétrons ainda se espalham por vários poços enquanto que neste mesmo valor, os auto-estados de buracos pesados estão confinados à apenas um poço quântico. Para campos iguais ou superiores a 60 kV/cm, verificamos um tunelamento de portadores dos poços da heteroestrutura. Os portadores que tunelaram se situam nas extremidades do sistema.

elétrons da banda de condução

buracos pesados da banda de condução

Fig 4.2 - Escada Wannier-Stark numa super-rede de 7 poços idênticos de comprimento do poço $L = 40$ Å, espessura da barreira $h = 15$ Å, para campos de 30, 60 e 90 kV/cm. O confinamento das auto-funções é bem maior nos portadores de massa efetiva mais pesada, como o buraco pesado. Para campos fortes, alguns auto-estados tunelaram devido à alta inclinação da heteroestrutura.

4.2 - AUTO-ENERGIAS E LARGURA DA MINI-BANDA EM FUNÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO

Nesta seção investigaremos as auto-energias da super-rede em função do campo elétrico. Para obter uma expressão que indique adequadamente o comportamento das auto-energias com o campo E , a equação de Schrödinger independente do tempo para o n -ésimo estado ficará definida por:

$$(\mathbf{H}^0 + \Delta U - q\mathbf{E}x)|\Psi_n\rangle = \varepsilon_n|\Psi_n\rangle \quad (4.04)$$

onde $\mathbf{H}^0$ representa o Hamiltoniano de poço isolado, ΔU o acoplamento entre poços, ε_n a auto-energia do n -ésimo estado. Como $|\varpi\rangle$ e ε_n^0 são a auto-função e auto-energia de um poço isolado, então $\varepsilon_n = \langle \Psi_n | \mathbf{H} | \Psi_n \rangle$ e, obtemos a seguinte relação:

$$\varepsilon_n(k) = \varepsilon_n^0 + \langle \varpi | \Delta U | \varpi \rangle - q\mathbf{E} \langle \varpi | x | \varpi \rangle + 2 \sum_{n=-N}^N \cos(knd) \int_{-\infty}^{\infty} [\varpi^*(x) \cdot \Delta U \cdot \varpi(x - nd) - q\mathbf{E} \varpi^*(x) x \varpi(x - nd)] dx \quad (4.05)$$

O somatório em “ n ” indica o número de períodos de repetição do potencial a partir do centro do sistema. A Eq. (4.05) dá uma idéia do comportamento das auto-energias, e foi calculada numericamente usando o Split-Operator indicando um decaimento com o aumento do campo, de acordo com a Fig. 4.3.

a) Auto-Energias dos elétrons da banda de condução em função do campo elétrico

b) Auto-Energias dos buracos leves e pesados da banda de valência em função do campo elétrico

Fig 4.3 - Evolução das energias dos auto-estados de elétrons da banda de condução e buracos da banda de valência em função do aumento do campo elétrico (itens a e b).

Pela Eq. (4.05), os valores de máximo e mínimo de energia $\varepsilon_{\max}$ e $\varepsilon_{\min}$ acontecem quando $\cos(knd) = \pm 1$. Assim, a largura $\Delta = \varepsilon_{\max} - \varepsilon_{\min}$ da mini-banda aumenta com o valor do campo elétrico de acordo com a expressão:

$$\Delta = \varepsilon_{\max z} - \varepsilon_{\min z} = 4 \sum_{n=-N}^N \left[\int_{-\infty}^{\infty} \varpi^*(x) \Delta U \cdot \varpi(x - nd) \cdot dx + qE \int_{-\infty}^{\infty} \varpi^*(x) x \cdot \varpi(x - nd) \cdot dx \right] \quad (4.06)$$

este resultado, juntamente com a densidade de níveis de energia $S_n = \Delta/n$ foram numericamente resolvidas utilizando-se o Split-Operator.

Largura da mini-banda e densidade de níveis de energia em função do campo elétrico

Fig 4.4 - Gráfico da Largura da mini-banda em função do campo elétrico.

Tabela 4.1- Valores numéricos da largura da mini-banda e densidade de níveis de energia para elétrons e buracos quando $E=0, 30, 60$ e 90 kV/cm.

E (kV/cm)	largura da mini-banda (meV)			densidade de níveis de energia (meV)		
	elétrons	buracos leves	buracos pesados	elétrons	buracos leves	buracos pesados
0	96.10	78.69	10.20	13.72	11.24	1.45
30	147.44	118.28	93.24	21.06	16.89	13.32
60	203.63	118.94	134.36	29.09	16.99	19.19
90	207.55	119.74	149.39	29.65	17.10	21.34

Seja $H_{sr}(x) = H^0 + \Delta U$ o Hamiltoniano da super-rede na ausência de campos externos e considere a equação de Schrödinger independente do tempo expressa na Eq. (4.04) para o n -ésimo estado $(H^0 + \Delta U - qEx)|\Psi_n\rangle = \varepsilon_n \cdot |\Psi_n\rangle$. Se efetuarmos uma translação $x \rightarrow x + jd$, temos que:

$$[H_{sr}(x) - qEx]|\Psi_n(x + jd)\rangle = (\varepsilon_n - jqEd) |\Psi_n(x + jd)\rangle \quad (4.07)$$

pois o Hamiltoniano da super-rede apresenta simetria de translação ($H_{sr}(x + jd) = H_{sr}(x)$). Consequentemente, $|\Psi_n(x + jd)\rangle$ também será solução da equação de Schrödinger como energia $\varepsilon_n' = \varepsilon_n - jqEd$. No limite em que o campo for fraco o suficiente para $|\Psi_n(x + jd)\rangle = |\Psi_n(x)\rangle$, os níveis de energia adjacentes estarão separados por uma diferença de qEd . A comparação dos dados obtidos numericamente e a previsão teórica neste limite estão sendo considerados na Fig. 4.5, onde percebemos por esta comparação que este limite não é obedecido pelos valores considerados neste trabalho, existindo grandes discrepâncias para valores de campo superiores a 30 kV/cm.

Fig. 4.5 - comparação entre a diferença de valores entre níveis adjacentes obtidos numericamente e previstos teoricamente no limite de campos fracos. As discrepância acontecem devido ao fato da super-rede ser finita, não valendo portanto o teorema de Bloch e pelo fato do campo elétrico desacoplar os níveis da mini-banda inicial.

4.3 - CONFINAMENTO DOS AUTO-ESTADOS EM FUNÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO

Na ausência de campos externos, um portador move-se ao longo da super-rede com um mesmo vetor de onda $k^{[55,56]}$. Para $E \neq 0$, as bandas inclinam e o portador sofre um confinamento que depende de sua massa efetiva e o valor do campo aplicado^[57,58], conforme Fig 4.2.

Fig 4.6 - Ao se aplicar um campo elétrico E na direção de crescimento da amostra, os portadores passam a se mover somente entre dois extremos x_1 e x_2 , que representam a localização no eixo x no qual o portador adquire os valores mínimo e máximo de energia permitida na banda.

Sendo Δ a largura da mini-banda, verificamos que o confinamento de um portador se restringe à região x_2-x_1 (vide Fig 4.6). Os pontos x_1 e x_2 representam a localização no eixo x no qual o portador adquire os valores mínimo e máximo de energia permitida na banda. Através do triângulo formado, temos que:

$$(x_2 - x_1) = \frac{\Delta}{\sqrt{(qE)^2 - 1}} = \frac{4}{\sqrt{(qE)^2 - 1}} \sum_{n=-N}^N \left(\int_{-\infty}^{\infty} \varpi^*(x) \Delta U \cdot \varpi(x - nd) \cdot dx + qE \int_{-\infty}^{\infty} \varpi^*(x) x \cdot \varpi(x - nd) \cdot dx \right) \quad (4.08)$$

Esta expressão indica que os auto-estados sofrem um confinamento pela presença do campo elétrico. Este confinamento aumenta conforme o campo vai atingindo valores mais altos e quando $(qE)^2 \gg 1$, ele tende a uma constante.

Em nossas simulações, constatamos que o valor esperado da posição e seu respectivo desvio padrão tendem a uma constante com o aumento do campo aplicado. Isto aconteceu a partir do campo de 60 kV/cm, para todos os portadores considerados. Para campos muito fortes, os auto-estados mais externos tunelaram para fora dos poços da heteroestrutura devido à forte inclinação de seu potencial. Isto acarretou nos “saltos” observados nos gráficos da Fig 4.7 e 4.8, pois uma vez fora dos poços, os portadores se situam nas extremidades do sistema.

Fig 4.7 - Ao se aplicar um campo elétrico E na direção de crescimento da amostra, os portadores passam a se mover somente entre dois extremos x_1 e x_2 . Os saltos bruscos que se verificam nestes gráficos tanto para elétrons quanto para buracos são auto-estados que tunelaram para fora dos poços da heteroestrutura, passando a se localizar nas extremidades do sistema.

Fig 4.8 - Desvio padrão dos auto-estados em função do campo elétrico numa super-rede de 7 poços. Os saltos são os auto-estados que saíram dos poços da heteroestrutura, passando a se localizar nas extremidades do sistema.

4.4- TUNELAMENTO INDUZIDO PELO CAMPO

Podemos definir por “função trabalho” W_n ao valor mínimo de energia necessária para permitir que um portador situado no n -ésimo nível escape^[59]. Esta função depende do portador, do nível considerado e do campo aplicado, cuja combinação resulta na altura V_o da barreira a ser vencida (vide Fig 4.9), a saber:

$$W_n = V_o - \varepsilon_n = q \cdot E(x_2 - x_1) \quad (4.09)$$

Alguns valores de W_n em função do campo elétrico para buracos leves e pesados foram tabelados. O caso dos elétrons não foi feito pois apenas quando $E = 90$ kV/cm é que ocorre o tunelamento.

Tabela 4.2- Valores da função trabalho para o sétimo auto-estado de buracos leves e pesados (nível mais externo), em função do campo elétrico.

Função Trabalho	$E = 30$ kV/cm	$E = 60$ kV/cm	$E = 90$ kV/cm
W_n (buracos leves) -(meV)	64.00	54.04	51.26
W_n (buracos pesados) -(meV)	30.46	25.37	19.92

Fig 4.9 - Esquema geral de um tunelamento induzido pelo campo elétrico. A função $W_N(x)$ é chamada de função trabalho e é igual ao valor mínimo de energia necessária para permitir que um portador situado neste nível escape.

4.5 - SUMÁRIO DO CAPÍTULO 4

Neste capítulo estudamos os efeitos de aplicação de um campo elétrico uniforme na direção de crescimento da super-rede. Constatamos as escadas Wannier-Stark para os elétrons e buracos para diversos valores de campo e o tunelamento de portadores dos poços no regime de campos fortes. As principais conclusões são:

- Na presença de um campo elétrico aplicado na direção de crescimento da super-rede acontece um “entortamento” dos poços da heteroestrutura. As funções de onda dos níveis se separam, formando uma “escada” de auto-estados que se distribuem ao longo da direção do campo.
- A largura das mini-bandas e a separação média dos níveis de energia aumentam com o valor do campo, devido à separação dos auto-estados da super-rede.
- O confinamento das auto-funções aumenta com o valor do campo. Estes efeitos são maiores nos buracos pois suas massas efetivas são maiores do que a dos elétrons.
- O valor esperado da posição tende a uma constante pois para campos muito fortes os auto-estados da super-rede se comportam como auto-estados de poços isolados na presença de campo elétrico.
- Quando o entortamento dos poços é muito grande, alguns portadores podem escapar dos poços, passando a se localizar nas extremidades do sistema. Devido a esta mudança de confinamento, foi observado um “salto” nos valores esperados da posição e desvio padrão dos estados tunelados.
- O valor do campo necessário ao tunelamento depende da geometria da super-rede e é menor quanto maior for a massa efetiva do portador.

CAPÍTULO 5

RESSONÂNCIA ENTRE AUTO-ESTADOS

Numa super-rede não dopada, as auto-energias dependem da massa efetiva dos portadores, da geometria do sistema e do valor do campo elétrico aplicado (vide Fig 5.1). Quando a diferença de energia entre dois níveis adjacentes atingir seu valor mínimo, acontecerá a ressonância entre estes auto-estados. Para níveis não subsequentes, as ressonâncias não ocorrem devido às interferências dos auto-estados que os permeiam.

A auto-funções em ressonância se modificam pela aproximação dos níveis. O pacote formado pela combinação destes auto-estados, oscila na região de *overlap* destas funções^[60,61]. O fenômeno tem chamado atenção pela possibilidade de construção de emissores de radiação.

Fig 5.1 - Energias entre estados subsequentes evidenciam as ressonâncias entre níveis de elétrons e buracos.

O objetivo deste capítulo será observar as ressonâncias para elétrons e buracos numa super-rede finita de seis poços idênticos, acrescidos de um outro contendo o dobro do comprimento, aparecendo desta forma um estado de Tamm no sistema. Calcularemos também a frequência de oscilação dos dipolos elétricos que se formam na condição de ressonância.

Na seção inicial, efetuaremos uma varredura nas auto-energias para determinar os valores de campo elétrico que causam a ressonância. Na seção 5.2 apresentaremos a

forma das auto-funções em ressonância do quinto e sexto auto-estados para elétrons e buracos. Escolhemos esta ressonância pelo confinamento das auto-funções na super-rede. Os valores esperados da posição em função do tempo também serão estudados nesta seção. Calcularemos as frequências de oscilação dos dipolos na seção 5.3. As conclusões do capítulo serão efetuadas na última seção.

Fig 5.2 - O primeiro poço desta super-rede apresenta 80 Å de comprimento ao passo que os outros possuem 40 Å. Isto faz aparecer um estado localizado neste sistema. A espessura das barreiras é de 15 Å. ME_c e ME_v representam a diferença de energia entre o estado de Tamm e o meio da mini-banda de energia. O parâmetro N é ordem de vizinhança dos poços da super-rede em relação ao poço da extremidade (N=1 para o vizinho mais próximo, N=2 para o segundo vizinho mais próximos e assim sucessivamente).

5.1 - RESSONÂNCIA ENTRE NÍVEIS SUBSEQUENTES

Através da varredura nas auto-energias em função do campo elétrico E , verificamos que o comportamento das auto-energias das mini-bandas obedecem a Eq. (4.05), indicando um decaimento com o aumento do campo, como mostrado na Fig 5.3.

Para explicar o afastamento dos níveis quando estes se aproximam do ponto de interceptação, usa-se a teoria de perturbação independente do tempo para níveis degenerados^[62,63]. Isto resulta em dois possíveis valores para a energia $\varepsilon_u^{(+)}$ e $\varepsilon_u^{(-)}$:

$$\varepsilon_u^{(\pm)} = \lambda_{uv} \pm \sqrt{\lambda_{uv}^2 + (qE)^2 |\langle \Psi_u | x | \Psi_v \rangle|^2} \quad (5.01)$$

$$\text{com } \begin{cases} \lambda_{uv} = [\varepsilon_u + \varepsilon_v + qE(\langle \Psi_u | x | \Psi_u \rangle + \langle \Psi_v | x | \Psi_v \rangle)]/2 \\ \bar{\lambda}_{uv} = [\varepsilon_u - \varepsilon_v + qE(\langle \Psi_u | x | \Psi_u \rangle - \langle \Psi_v | x | \Psi_v \rangle)]/2 \end{cases}$$

onde $|\Psi_u(x)\rangle$, $|\Psi_v(x)\rangle$, ε_u e ε_v são as auto-funções e auto-energias do u e v -ésimo nível não perturbado. Estas energias foram numericamente calculadas utilizando-se o método do Split-Operator, cujos resultados são fornecidos na tabela 5.1:

auto-energias dos elétrons em função do campo elétrico

auto-energias dos buracos leves e pesados em função do campo elétrico

Fig 5.3 - Níveis de energia em função do campo elétrico. Quando os níveis subsequentes atingem a separação mínima significa que está ocorrendo ressonância para estes níveis.

Tabela 5.1 - Níveis de ressonância para os portadores em função do campo elétrico E aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura.

Ressonância	elétrons			buracos leves			buracos pesados		
	$\varepsilon_u^{(+)} \text{ (meV)}$	$\varepsilon_u^{(-)} \text{ (meV)}$	$E \text{ (kV/cm)}$	$\varepsilon_v^{(+)} \text{ (meV)}$	$\varepsilon_v^{(-)} \text{ (meV)}$	$E \text{ (kV/cm)}$	$\varepsilon_u^{(+)} \text{ (meV)}$	$\varepsilon_u^{(-)} \text{ (meV)}$	$E \text{ (kV/cm)}$
[1] e [2]	-259.19	-263.27	10.0	-1842.85	-1846.14	9.0	-1823.63	-1828.80	5.0
[2] e [3]	-258.00	-262.81	15.0	-1844.75	-1849.24	10.0	-1832.77	-1838.73	9.0
[3] e [4]	-271.57	-264.30	25.0	-1844.15	-1851.84	15.0	-1840.85	-1847.94	13.0
[4] e [5]	-278.81	-265.25	37.0	-1843.59	-1854.40	20.0	-1859.76	-1868.00	15.0
[5] e [6]	-256.25	-279.49	47.0	-1839.17	-1855.82	39.0	-1888.74	-1898.84	23.0
[6] e [7]	-245.78	-281.96	75.0	-1809.39	-1825.20	85.0	-1892.90	-1903.76	35.0

A separação mínima entre as energias dos níveis u e v , representada por $\Delta\varepsilon_u$, é determinada pela expressão:

$$\Delta\varepsilon_u = \varepsilon_u^{(+)} - \varepsilon_u^{(-)} = 2\sqrt{\frac{\varepsilon_u - \varepsilon_v + qE(\langle\Psi_u|x|\Psi_u\rangle - \langle\Psi_v|x|\Psi_v\rangle)}{2} + (qE)^2|\langle\Psi_u|x|\Psi_v\rangle|^2} \quad (5.02)$$

A separação (split energético) sempre possui um valor mínimo nas ressonâncias. Quanto mais pesado é o portador, menores são os valores de campo necessário para ocorrerem as ressonâncias (veja a comparação entre elétrons e buracos pesados, na Tabela 5.1). No limite de acoplamento fraco (ver cap. 4), o campo necessário para existir ressonâncias é aproximadamente dado por $E_n \approx ME_v/(Nqd+2qL)$, onde q é a carga do portador, $L=40 \text{ \AA}$

representa o comprimento de um dos poços, $d = 55 \text{ \AA}$ é o período de repetição da super-rede, ΔE_c representa a diferença de energia entre o estado de Tamm e o meio da minibanda de energia e o parâmetro N é a ordem de vizinhança dos poços em relação ao poço da extremidade ($N=1$ para o vizinho mais próximo, $N=2$ para o segundo e assim sucessivamente). Com isto construímos a seguinte tabela:

Ressonância	Elétrons				Buracos Leves				Buracos Pesados			
	ΔE_n (meV)		E (kV/cm)		ΔE_n (meV)		E (kV/cm)		ΔE_n (meV)		E (kV/cm)	
	Split-Operator	campo fraco	Split-Operator	campo fraco	Split-Operator	campo fraco	Split-Operator	campo fraco	Split-Operator	campo fraco	Split-Operator	campo fraco
[1] e [2]	4.1	9.2	10.0	16.9	3.6	7.8	9.0	14.1	5.2	3.2	5.0	5.9
[2] e [3]	4.8	13.6	15.0	24.8	4.9	9.0	11.0	16.3	6.0	3.7	8.0	6.8
[3] e [4]	7.3	16.2	25.0	29.4	7.7	10.6	15.0	19.3	7.1	4.4	13.0	8.1
[4] e [5]	13.5	19.8	37.0	36.0	10.2	13.0	20.0	23.6	8.2	5.4	15.0	9.9
[5] e [6]	18.2	25.5	47.0	46.4	14.8	16.7	39.0	30.4	10.1	7.0	23.0	12.8
[6] e [7]	36.2	35.9	75.0	65.3	16.2	23.6	85.0	42.8	10.8	9.9	35.0	18.0

separação mínima de energia de níveis adjacentes e valores de campo ressonantes para os elétrons

separação mínima de energia de níveis adjacentes e valores de campo ressonantes para os buracos leves

separação mínima de energia de níveis adjacentes e valores de campo ressonantes para os buracos pesados

Fig 5.4 - separação mínima dos níveis de energia e valores de campo ressonantes para elétrons e buracos. Comparações dos valores numéricos com o limite de acoplamento fraco foram efetuadas.

Pela varredura efetuada nos níveis subsequentes verificamos que:

- a separação mínima dos níveis de energia aumenta com o valor do campo, conforme Fig 5.4,
- os auto-estados de energia mais alta são os que necessitam de um campo elétrico de maior valor,
- os portadores de massa efetiva menor necessitam de um campo maior para entrarem em ressonância.

5.2 - AUTO-FUNÇÕES NA CONDIÇÃO DE RESSONÂNCIA

Passaremos agora à análise da forma das auto-funções na ressonância. Nesta condição, os auto-estados se combinam de modo que as funções de onda resultantes são descritas pela combinação linear das duas funções antigas $|\Psi_u\rangle$ e $|\Psi_v\rangle$. Na aproximação de *Tight-Binding*, as novas auto-funções $|\gamma_u(t)\rangle$ e $|\gamma_v(t)\rangle$ serão representadas por:

$$\begin{cases} |\gamma_u(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\exp(-i\omega_u t) |\Psi_u\rangle + \exp(-i\omega_v t) |\Psi_v\rangle] & \text{(simetrica)} \\ |\gamma_v(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [\exp(-i\omega_u t) |\Psi_u\rangle - \exp(-i\omega_v t) |\Psi_v\rangle] & \text{(anti - simetrica)} \end{cases} \quad (5.03)$$

a) Ressonância entre o quinto e o sexto auto-estado eletrônico

b) Ressonâncias entre o quinto e sexto auto-estado nas bandas de valência

Fig 5.5 - Para valores determinados de campo elétrico, pode acontecer ressonâncias entre níveis. Nesta figura, podemos perceber que o quinto e o sexto níveis estão bem mais próximos um do outro do que os demais. Podem ocorrer outras ressonâncias envolvendo estados diferentes para outros valores de campo elétrico.

A ressonância entre o quinto e o sexto nível para os elétrons da banda de condução e os buracos leves e pesados são mostrados na Fig. 5.5. Esta ressonância foi escolhida por acontecer a valores de campos onde as funções de onda se encontram mais confinadas.

O pacote formado pela soma destes auto-estados oscilará entre as regiões onde o módulo de $|\Psi_u\rangle$ e $|\Psi_v\rangle$ são relevantes. O valor esperado da posição do pacote ficará:

$$\langle X_p(t) \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[\langle \Psi_u | x | \Psi_u \rangle + \langle \Psi_v | x | \Psi_v \rangle + 2 \langle \Psi_u | x | \Psi_v \rangle \cdot \cos \left(\frac{(\varepsilon_u - \varepsilon_v) \Delta t}{\hbar} \right) \right] & \text{(simétrica)} \\ \frac{1}{2} \left[\langle \Psi_u | x | \Psi_u \rangle + \langle \Psi_v | x | \Psi_v \rangle - 2 \langle \Psi_u | x | \Psi_v \rangle \cdot \cos \left(\frac{(\varepsilon_u - \varepsilon_v) \Delta t}{\hbar} \right) \right] & \text{(anti-simétrica)} \end{cases} \quad (5.04)$$

A largura de oscilação é determinada pelo overlap entre os auto-estados u e v , que é quatro vezes $\langle \Psi_u | x | \Psi_v \rangle$. A situação complica se as interações entre os auto-estados da mini-banda^[64,65] atuarem fortemente, conforme é mostrado na Fig. 5.6 para a ressonância entre os dois primeiros níveis de cada portador.

A velocidade pode ser encontrada derivando-se o valor esperado da posição em relação ao tempo:

$$\langle V_p(t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle X_p(t) \rangle = \pm 2 \cdot \frac{\Delta \varepsilon_{uv}}{\hbar} \cdot \langle \Psi_u | x | \Psi_v \rangle \cdot \sin \left(\frac{\Delta \varepsilon_{uv}}{\hbar} \Delta t \right) \quad (5.05)$$

onde o sinal negativo é para a função simétrica e o sinal positivo para a anti-simétrica. Gráficos destas grandezas para elétrons e buracos são mostrados na Fig 5.7:

Fig 5.6 - Valores esperados da posição em função do tempo para elétrons, buracos leves e buracos pesados quando o primeiro e segundo nível entram em ressonância. Estas oscilações são devidas à delocalização das funções de ondas envolvidas acrescidas das influências dos outros auto-estados.

velocidade para a primeira ressonância de elétrons

velocidade para a primeira ressonância de buracos leves e pesados

Fig 5.7 - Velocidade em função do tempo para elétrons, buracos leves e buracos pesados quando o primeiro e segundo nível entram em ressonância.

5.3 - FREQUÊNCIAS DE OSCILAÇÃO DOS NÍVEIS RESSONANTES

Uma vez em ressonância, os auto-estados oscilam em torno de uma determinada região do espaço regida pelo *overlap* das funções de onda. A frequência desta oscilação depende da separação entre as auto-energias dos níveis considerados e é dada por $\nu_{uv} = |\epsilon_u - \epsilon_v| / h$ (h é a constante de Planck). Estas oscilações só ocorrem para valores bem específicos do campo elétrico, constituindo-se em uma desvantagem pois mesmo para campos próximos, as interferências das outras auto-funções já introduzem perturbações. Os gráficos das frequências de oscilação em função do campo são mostradas na Fig. 5.8. Sendo $\omega_{uv} = 2\pi/\tau_{uv}$ as frequências angulares, temos que esta grandeza aumenta com o campo elétrico, cujos valores são fornecidos na Tabela 5.2.

a) Frequência de ressonância dos elétrons em função do campo elétrico

b) Frequência de ressonância dos buracos leves e pesados em função do campo elétrico

Fig 5.7 - As frequências de oscilação são maiores conforme o campo elétrico aumenta. Estas oscilações só ocorrem para valores bem determinados de campo. Mesmo para campos próximos, as interferências dos outros auto-estados já destroem esta oscilação

Tabela 5.2- Frequências angulares dos pacotes na ressonância. Comparamos a frequência obtida com a calculada no limite de campos fracos, onde vale a relação $\omega = qEd/\hbar$.

a) elétrons

	$\omega_{12} (fs^{-1})$	$\omega_{23} (fs^{-1})$	$\omega_{34} (fs^{-1})$	$\omega_{45} (fs^{-1})$	$\omega_{56} (fs^{-1})$	$\omega_{67} (fs^{-1})$
Frequência (campos fracos)	0.008	0.013	0.021	0.031	0.039	0.063
Frequência	0.006	0.023	0.048	0.080	0.115	0.150
E(kV/cm)	10	15	25	37	47	75

b) buracos leves

	$\omega_{12} (fs^{-1})$	$\omega_{23} (fs^{-1})$	$\omega_{34} (fs^{-1})$	$\omega_{45} (fs^{-1})$	$\omega_{56} (fs^{-1})$	$\omega_{67} (fs^{-1})$
Frequência (campos fracos)	0.008	0.009	0.013	0.021	0.033	0.071
Frequência	0.005	0.008	0.012	0.015	0.022	0.034
E(kV/cm)	9	11	15	20	39	85

c) buracos pesados

	$\omega_{12} (fs^{-1})$	$\omega_{23} (fs^{-1})$	$\omega_{34} (fs^{-1})$	$\omega_{45} (fs^{-1})$	$\omega_{56} (fs^{-1})$	$\omega_{67} (fs^{-1})$
Frequência (campos fracos)	0.004	0.007	0.011	0.013	0.019	0.029
Frequência	0.0018	0.0019	0.0022	0.0024	0.0025	0.003
E(kV/cm)	5	8	13	15	23	35

5.4 - SUMÁRIO DO CAPÍTULO 5

Neste capítulo, estudamos as ressonâncias que ocorrem entre dois auto-estados subsequentes numa super-rede de sete poços. As principais observações foram:

- A separação entre as auto-energias do sistema depende do portador, dos níveis considerados e do campo elétrico aplicado na heteroestrutura.
- Os níveis de energia são separados com o incremento do campo elétrico. Com isto, a largura das mini-bandas aumenta.
- Quando a diferença entre duas auto-energias de estados subsequentes atinge seu mínimo, ocorre a ressonância. Esta diferença é menor para estados de energias mais baixas.
- A ressonância só acontece para níveis adjacentes e valores bem específicos de campo elétrico. Caso contrário, ocorrerá interferências dos outros auto-estados do sistema.
- As auto-funções dos níveis em ressonância são mais distribuídas ao longo do sistema do que os não ressonantes. Na aproximação *Tight-Binding*, a forma das funções de onda são descritas por uma combinação simétrica e assimétrica das auto-funções antigas (na condição de não-ressonância).
- Os pacotes com os estados em ressonância oscilam nas regiões onde as funções de onda apresentam *overlap* apreciável. As interações com os outros níveis fazem com que a forma senoidal das oscilações dos valores esperados da posição e velocidade seja alterada.
- Existe a emissão de radiação de dipolo elétrico quando ocorre níveis ressonantes numa mini-banda e níveis localizados nas outras. A frequência de emissão aumenta com o valor do campo elétrico no sistema.

CAPÍTULO 6

DINÂMICA DE PACOTES DE ONDAS

Nos capítulos anteriores, efetuamos simulações numéricas de super-redes com e sem a presença de campo elétrico, para obter os auto-estados do sistema. Com estes auto-estados, podemos construir pacotes de ondas, conforme Fig. 6.1. A dinâmica dos pacotes é determinada pelas fases dos auto-estados que os compõem.

Comparação das formas dos pacotes de ondas dos elétrons da banda de condução em função do campo elétrico

Fig. 6.1 - Pacotes de ondas com os três e quatro primeiros auto-estados (PAC1 e PAC2), numa Super-Rede contendo 7 poços idênticos, quando o campo elétrico é de 30, 60 e 90 kV/cm.

objetivo deste capítulo é estudar a dinâmica dos pacotes de ondas dos portadores para valores de campo elétrico iguais a 30 e 90 kV/cm. Construiremos dois pacotes de ondas diferentes para cada portador, sendo que o primeiro conterá a soma do estado fundamental, primeiro e segundo estados excitados, enquanto que o outro será formado pelas quatro primeiras auto-funções do sistema. Estes dois pacotes apresentam a vantagem de possuírem o máximo de auto-estados que permaneçam localizados nos poços da super-rede no limite de campos fortes. Nas seções 6.1, 6.2 e 6.3 estudaremos o comportamento das energias, amplitudes de correlação e valores esperados da posição e potencial dos pacotes em função do tempo. Na seção 6.4 forneceremos um modo de produção dos pacotes de ondas eletrônicos. Estes pacotes podem ser produzidos através de excitações óticas envolvendo um *laser* com frequência e largura de dispersão bem definidos. Na última seção apresentaremos nossas conclusões.

6.1 - AMPLITUDE DE CORRELAÇÃO DE PACOTES DE ONDAS

Um pacote de ondas $|P_n(t)\rangle$ é definido pela soma de dois ou mais auto-estados $|\Psi_j\rangle$ com energias ε_j e fases ϕ_j . Sendo M o número de auto-estados que formam o pacote, temos que:

$$|P_n(t)\rangle = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{j=1}^M \exp\left[i\left(\frac{\varepsilon_j \cdot t}{\hbar} - \phi_j\right)\right] |\Psi_j\rangle \quad (2 \leq M \leq N) \quad (6.01)$$

Fig. 6.2 - Amplitudes de Correlação em função do tempo para pacotes de ondas eletrônicas sob um campo de 90 kV/cm (Gráficos Superiores) e de buracos pesados a 30 kV/cm (Gráficos Inferiores). Apesar destes gráficos serem de portadores e campos diferentes, os pacotes de ondas voltam à sua forma original, após certo tempo.

Através desta definição, elaboramos a construção de dois pacotes de ondas distintos, denominados de PAC1 e PAC2. Uma vez formado o pacote de ondas inicial, passamos à sua evolução temporal. Um indicador do quanto estes pacotes se modificarão com o decorrer do tempo é dado pela amplitude de correlação $C(t)$. Ela pode ser calculada através da integral do pacote de ondas inicial com o mesmo pacote no instante t e é dada por:

$$C(t) = \langle P_n(t=0) | P_n(t) \rangle = \frac{1}{M} \sum_{j=1}^M \cos\left(\frac{\varepsilon_j t}{\hbar}\right) \quad (6.02)$$

que possui um caráter oscilatório devido às múltiplas auto-funções que compõem o pacote. Este comportamento foi verificado para todos os pacotes simulados neste trabalho como mostrado na Fig. 6.2.

De acordo com a Eq. (6.02), a modificação da forma dos pacotes de onda em função do tempo é dependente das auto-energias do sistema. Como estas são

dependentes do campo, então a amplitude de correlação é um funcional do campo aplicado. Isto pode ser visto pela Fig. 6.3, utilizando-se o Split-Operator. Por esta figura, o PAC2 voltou 5 vezes à sua forma inicial num campo de 30 kV/cm. Neste mesmo intervalo, ele retornou apenas 3 vezes quando elevamos o campo para 90 kV/cm. Isto decorre do fato das auto-funções a 90 kV/cm estarem bem mais isoladas do que a 30 kV/cm.

Fig. 6.3 - Amplitudes de Correlação dos pacotes, indicando o quanto elas se modificam de sua forma inicial com o passar do tempo para campos diferentes. Para um mesmo intervalo de tempo, o PAC2 voltou 5 vezes à sua forma inicial quando o campo era de 30 kV/cm, enquanto que para 90 kV/cm apenas 3 vezes.

6.2 - CONFINAMENTO ESPACIAL DOS PACOTES DE ONDAS

Uma vez formado os pacotes de ondas dos portadores, estes passam a oscilar em uma certa região do espaço. Este confinamento depende do número de auto-funções nele contido além do valor do campo aplicado. O valor esperado da posição $\langle X_p(t) \rangle = \langle P_n(t) | x | P_n(t) \rangle$ e seu desvio padrão $\sigma = \sqrt{\langle x(t)^2 \rangle - \langle x(t) \rangle^2}$ indicam o confinamento do pacote, como mostra a seguinte expressão:

$$\langle X_p(t) \rangle = \frac{1}{M} \left[\sum_{j=1}^M \langle \Psi_j | x | \Psi_j \rangle + 2 \cdot \sum_{l>j=1}^M \cos \left(\frac{(\varepsilon_l - \varepsilon_j)t}{\hbar} - (\phi_l - \phi_j) \right) \langle \Psi_j | x | \Psi_l \rangle \right] \quad (6.03)$$

Esta expressão apresenta um caráter oscilatório em torno dos auto-estados que compõem o pacote. A velocidade desenvolvida pelos pacotes também é oscilatória, conforme vemos na Fig. 6.4, devido ao confinamento espacial. Sua expressão é conseguida através da derivada temporal de $\langle X(t) \rangle$:

$$\langle V_p(t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle X_p(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} \langle [X, \mathbf{H}] \rangle + \left\langle \frac{\partial X}{\partial t} \right\rangle \quad (6.04)$$

no caso $\langle \partial X / \partial t \rangle = 0$ pois este observável não é dependente do tempo. O valor esperado do comutador de X com o Hamiltoniano $\mathbf{H}(x)$ será igual ao valor esperado do momento dividido pela massa efetiva m_n ($\langle [X, \mathbf{H}(x)] / i\hbar \rangle = \langle \mathbf{P}(x) / m_n^* \rangle$). Com isto, o valor esperado da velocidade torna-se:

$$\langle V_p(t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle X_p(t) \rangle = -\frac{2}{M} \sum_{l,j=1}^M \frac{(\varepsilon_l - \varepsilon_j)}{\hbar} \sin \left(\frac{(\varepsilon_l - \varepsilon_j)\Delta t}{\hbar} - (\phi_j - \phi_l) \right) \langle \Psi_j | x | \Psi_l \rangle \quad (6.05)$$

Estas oscilações dependem do produto de auto-funções de níveis diferentes (quando $j=1$, o termo do seno se anula). As Eqs. (6.03) e (6.05) nos indicam um comportamento não periódico que foram calculados numericamente e mostrados na Fig. 6.4 abaixo:

a) Valor Esperado da Posição e respectivo desvio padrão em função do tempo

b) Valor Esperado da velocidade em função do tempo

Fig. 6.4 - a) Valores esperados da posição e seus respectivos desvio padrão para pacotes de ondas eletrônicas e de buracos pesados contendo os três primeiros auto-estados, numa super-rede, quando o campo elétrico é igual a 30 kV/cm. b) - Valores esperados da velocidade dos pacotes de ondas com quatro auto-estados quando o campo elétrico aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura é igual a 30 e 90 kV/cm, que seguem o comportamento de $\langle X(t) \rangle$.

6.3 - VALORES ESPERADOS DO POTENCIAL E EVOLUÇÃO DAS ENERGIAS DO PACOTE

A evolução temporal do valor esperado do potencial possui a forma da Eq. (6.03), trocando o operador X pelo potencial $V(x)$, resultando na expressão abaixo:

$$\langle V(t) \rangle = \frac{1}{M} \left[\sum_{j=1}^M \langle \Psi_j | V(x) | \Psi_j \rangle + 2 \sum_{l>j=1}^M \cos \left(\frac{(\varepsilon_l - \varepsilon_j)t}{\hbar} - (\phi_l - \phi_j) \right) \langle \Psi_j | V(x) | \Psi_l \rangle \right] \quad (6.06)$$

Estas oscilações dependerão do valor do campo elétrico e da massa efetiva do portador considerado. Pelo fato dos pacotes envolverem mais de um auto-estado, as oscilações não formarão uma senoide perfeita mas sim uma função periódica que possuem diversas cristas e depressões devido ao *overlap* das auto-funções de níveis diferentes (vide Fig. 6.5). Esta grandeza apresenta termos independentes do tempo. As oscilações temporais são devidas às contribuições dos níveis, sendo maior a diferença de energia entre os auto-estados, maior é a sua contribuição para a frequência de vibração do pacote. Pelo fato do pacote possuir mais de uma frequência de oscilação, eles sempre apresentam as “tremulações” vistas em todas as evoluções temporais.

valores esperados do potencial em função do tempo, para valores de campo de 30 e 90 kV/cm

Fig. 6.5 - Valores esperados do potencial formada por pacotes de ondas com três e quatro auto-estados quando o campo elétrico aplicado na direção de crescimento da heteroestrutura é igual a 30 e 90 kV/cm seguem o comportamento de $\langle X(t) \rangle$.

A energia de cada pacote deveria ser constante já que não há nenhum termo dissipativo no Hamiltoniano considerado. Uma pequena oscilação se verifica na Fig. 6.6,

devido à aproximação feita no Split-Operator quando propagamos o pacote de onda. Esta aproximação, descrita no capítulo 1 é dada por:

$$|\Psi_n(t + \Delta t)\rangle = \exp\left[\frac{-i\Delta t}{\hbar} \frac{V(r,t)}{2}\right] \cdot \exp\left[\frac{-i\Delta t}{\hbar} \frac{P^2(r)}{2m_n^*}\right] \exp\left[\frac{-i\Delta t}{\hbar} \frac{V(r,t)}{2}\right] |\Psi_n(t)\rangle + O(\Delta t^3) \quad (6.07)$$

Fig. 6.6 - Flutuações da energia dos pacotes em função do tempo. Essas flutuações são devidas a termos de ordem Δt^3 desprezados na propagação do pacote. Quanto menor for a relação $\Delta x/\Delta t$ menor é a flutuação resultante. Por isto, costuma-se colocar intervalos de tempo muito pequenos de modo que estas flutuações sejam desprezíveis.

6.4 - CRIAÇÃO DOS PACOTES ATRAVÉS DE UM LASER

Para produzir pacotes de ondas eletrônicas, o elétron da banda de valência deve transicionar para a de condução através a absorção da energia fornecida por algum agente externo, como por exemplo um *laser*. O valor da energia do *laser* depende do portador e dos níveis envolvidos na produção do pacote.

Na produção do PAC1 eletrônico, a energia do *laser* deve permitir os elétrons saltarem do estado fundamental de buracos pesados até os três primeiros níveis eletrônicos. No PAC2, esta energia deve permitir os elétrons saltarem até os quatro primeiros níveis. Isto provoca o aparecimento de pares elétron-buraco na heteroestrutura. O estado fundamental do buraco pesado é o relevante em nossos sistemas por produzir a menor energia de excitação. Sendo $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3, \dots$, as energias da banda de condução de um pacote de r estados, ε_{1hh} a energia do estado fundamental de buracos pesados, então a energia ε_L do *laser* necessária à criação de um determinado pacote de ondas será:

$$\varepsilon_L = \sum_{j=1}^r \frac{\varepsilon_j}{r} - \varepsilon_{1hh} = \varepsilon_{med} - \varepsilon_{1hh} \quad (6.08)$$

Sendo ε_{med} o nível de energia média, dada pela média aritmética das auto-energias. No PAC 1 eletrônico os elétrons saltam do estado fundamental do buraco pesado até os três primeiros níveis da banda de condução, envolvendo $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \varepsilon_3$. No PAC 2 acontece a mesma coisa mas os elétrons vão até o quarto nível eletrônico. A frequência do *laser* $\nu_L = \varepsilon_L/h$ deverá ser determinada pela expressão $\nu_L = (\varepsilon_{med} - \varepsilon_{1hh})/h$. Sua dispersão $\Delta\nu_L$ é dada $\Delta\nu_L = (\varepsilon_e - \varepsilon_{med})/h$, cujos gráficos se encontram na Fig 6.7

a) separação entre o nível fundamental dos buracos pesados e os quatro e cinco primeiros níveis de energia eletrônicos em função do campo elétrico

b) frequências e largura de dispersão do laser que provoca o aparecimento do PAC1 e PAC2

Fig. 6.7- a): Separação entre o nível fundamental dos buracos pesados e os quatro (gráfico à esquerda) e cinco (gráfico à direita) primeiros níveis de energia eletrônicos em função do campo elétrico. b): Frequência do laser que provoca o aparecimento do PAC1 e 2 (gráfico à esquerda). Respetivas larguras de dispersão do laser (gráfico à direita).

Tabela 6.1 - Energia média do PAC 1 e PAC 2 eletrônicos em função do campo elétrico. Em sequência, as frequências e larguras de dispersão do laser necessários à formação dos pacotes de ondas eletrônicos PAC 1 e PAC 2 para diferentes valores do campo elétrico são fornecidos

E(kV/cm)	PAC 1 en_{med} (EL) (meV)	PAC 1 $en_4 - en_{med}$ (meV)	PAC 1 $en_{med} - en_1$ (HH) (meV)	PAC 2 en_{med} (EL) (meV)	PAC 2 $en_5 - en_{med}$ (meV)	PAC 2 $en_{med} - en_1$ (HH) (meV)
0	-238.90	29.02	1563.59	-231.64	7.25	1570.84
5	-247.60	26.88	1556.00	-240.88	6.72	1562.72
10	-256.81	25.52	1548.32	-250.43	6.38	1554.70
15	-266.51	24.79	1552.85	-260.31	6.19	1559.05
25	-287.71	26.64	1566.72	-281.05	6.66	1573.38
29	-297.73	31.87	1572.11	-289.77	7.96	1580.08
35	-314.00	42.24	1577.64	-303.44	10.56	1588.20
40	-328.05	49.23	1581.79	-315.74	12.30	1594.10
45	-342.38	54.38	1585.69	-328.78	13.59	1599.29

E(kV/cm)	PAC 1 ν (fs ⁻¹)	PAC 1 $\Delta\nu$ (fs ⁻¹)	PAC 2 ν (fs ⁻¹)	PAC 2 $\Delta\nu$ (fs ⁻¹)
0	0.378	0.007	0.379	0.0021
5	0.376	0.007	0.377	0.0020
10	0.374	0.006	0.375	0.0018
15	0.375	0.007	0.376	0.0019
25	0.376	0.008	0.377	0.0020
29	0.378	0.009	0.379	0.0021
35	0.380	0.011	0.381	0.0023
40	0.382	0.013	0.383	0.0027
45	0.384	0.015	0.385	0.0032

As frequências e dispersões permanecem pouco sensíveis com aumento do valor do campo elétrico, pois $|\epsilon_{med} - \epsilon_{1hh}|$ é aproximadamente constante.

6.5 - SUMÁRIO DO CAPÍTULO 6

Neste capítulo investigamos a dinâmica dos portadores da banda de condução e valência. Este estudo foi feito através da evolução temporal de pacotes de ondas contendo três e quatro auto-estados de uma super-rede de 7 poços. Nossas principais conclusões são dadas a seguir:

- A forma do pacote de ondas depende da geometria do sistema, massa efetiva do portador, número de níveis que formam o pacote e do campo elétrico aplicado.
- As características dinâmicas dos pacotes são determinadas pelas auto-energias e fases das funções de onda. Seus resultados possuem um caráter oscilatório não periódico nos campos de 30 e 90 kV/cm.
- A evolução da amplitude de correlação de um pacote de ondas depende do campo aplicado. Para um mesmo intervalo de tempo, um pacote de ondas voltou cinco vezes à sua forma inicial num campo de 30 kV/cm e apenas três vezes quando elevamos o campo para 90 kV/cm. Isto decorre do fato das auto-funções a 90 kV/cm estarem bem mais isoladas do que a 30 kV/cm.
- A energia de cada pacote deveria ser constante já que não há nenhum termo dissipativo no Hamiltoniano considerado. Uma pequena oscilação se verifica devido à aproximação feita no Split-Operator quando propagamos o pacote de onda.
- Uma possível maneira de produzir pacotes de ondas na banda de condução ocorre quando elétrons da banda de valência são elevados à banda de condução através da absorção de energia por um *laser*. Este *laser* deve ter um valor específico de frequência e largura de dispersão, dependendo do portador considerado, número de auto-funções do pacote e do valor do campo na heteroestrutura.
- A frequência e largura de dispersão do *laser* na produção de pacotes de ondas na banda de condução apresenta uma pequena variação de seus valores no intervalo de 0 a 90 kV/cm.

CAPÍTULO 7

CONCLUSÕES

Neste trabalho, investigamos o comportamento dos auto-estados nas bandas de condução e valência a uma temperatura de 0 Kelvin de uma super-rede de $\text{Al}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ na aproximação de bandas independentes. A concentração de alumínio escolhida foi de 20 % para que o sistema tivesse *gap* direto. Nas análises numéricas utilizamos o método do Split-Operator, cujas principais virtudes são:

- boa estabilidade,
- rápida convergência dos resultados;
- aplicação a potenciais estáticos ou dependentes do tempo,;
- independência da forma inicial das funções de onda;
- possibilidade do estudo de transientes da ordem de femtosegundos (10^{-15} segundos) quando a propagação dos resultados é feita em tempo real;
- obtenção das auto-funções, auto-energias e valores esperados através da troca do tempo real t pelo imaginário $-i\tau$.

Na ausência de campos externos, as funções de onda de uma super-rede se espalham por todos os poços, formando mini-bandas semelhantes às encontradas em sólidos cristalinos convencionais. A largura da mini-banda $\Delta\epsilon$ (diferença entre o estado fundamental e o último estado excitado), depende da largura dos poços, além da largura e altura das barreiras. Na super-rede finita, além dos aspectos anteriormente mencionados, o número de poços da heteroestrutura também deve ser levado em conta. Todos estes fatores determinam o grau de interações entre os auto-estados do sistema, e $\Delta\epsilon$ será tão largo quanto maior as interações. Foram investigados o comportamento das auto-funções, das auto-energias e dos valores esperados da posição em função do número de poços da heteroestrutura (3, 5, 7 e 9 poços idênticos). Constatamos que $\Delta\epsilon$ tendia a uma constante com o aumento do número de poços do sistema, ao passo que a separação entre os níveis diminuía. Através da comparação dos valores encontrados para a largura da mini-banda entre os portadores, verificamos que $\Delta\epsilon_{\text{eletrons}} > \Delta\epsilon_{\text{buracos leves}} > \Delta\epsilon_{\text{buracos pesados}}$. Fato semelhante aconteceu para a diferença entre o fundo do poço e o estado fundamental dos portadores.

Uma maneira de interromper a periodicidade da super-rede pode ser conseguido através do alargamento de um dos poços do sistema. Devido à sua largura ser superior aos demais, este poço possui um maior “poder de confinamento” das auto-funções e faz aparecer estados localizados denominados estados de Tamm. Estes estados estão restritos às imediações do mesmo, possuindo energias diferentes do que aquelas encontradas nas mini-bandas. Quanto maior for a largura do poço mais largo, menor são as interações entre o estado de Tamm e os da mini-banda. Estes efeitos foram estudados através do alargamento do poço situado numa das extremidades de uma super-rede contendo 7 poços. A largura deste poço foi de 80, 120, 160 e 200 Å, aparecendo mais de um estado localizado a partir de 120 Å. Isto foi analisado através da discrepância dos valores esperados da posição $\langle X \rangle$, apresentado entre os estados da mini-banda e o de Tamm. Numa super-rede infinita, a posição do poço mais largo é irrelevante. Para um

número finito de poços, verifica-se uma dependência da posição na forma das auto-funções, auto-energias e valores esperados do sistema, fixando em 60 Å o tamanho do poço mais largo, produzindo apenas um estado de Tamm. Os valores mínimos das grandezas calculadas acontecem quando o poço mais largo se situa no meio do sistema, devido à recuperação parcial da simetria da super-rede.

Na presença de um campo elétrico E uniforme na direção de crescimento da amostra, as bandas de energia se inclinam. As mini-bandas tendem a se separar numa série de estados distribuídos sequencialmente ao longo da direção do campo, formando uma escada de auto-estados (Escada Wannier-Stark). Este efeito aparece primeiramente nos portadores de maior massa efetiva (buracos pesados), seguidos dos buracos leves e elétrons. Isto se deve aos auto-estados de buracos pesados serem menos interagentes. Devido a localização e separação dos auto-estados, as larguras das mini-bandas aumentam com o incremento do valor do campo elétrico, ao passo que os valores esperados da posição tendem a uma constante. Verificamos a formação da escada Wannier-Stark para campos de 30, 60 e 90 kV/cm. Quando o módulo da energia potencial elétrica $|qEd|$ for muito maior que a largura da mini-banda das Bandas de Condução ou Valência $|\Delta\epsilon_{c,v}|$, a inclinação do potencial da heteroestrutura provoca a saída de portadores dos poços (Tunelamento Induzido pelo Campo). Neste regime, o acoplamento entre os poços é destruído e os auto-estados se comportam como auto-estados de poços isolados na presença de campo elétrico. Os elétrons e buracos escapam dos poços, após vencerem a “função trabalho”, que é a energia mínima necessária para permitir que um portador situado num certo nível escape, que depende do valor do campo aplicado. Quanto maior for o valor da massa efetiva, menor será o valor do campo necessário para existir este tunelamento. Observamos um salto nos valores esperados da posição e desvio padrão destes estados, ficando as auto-funções que tunelaram localizadas próximas às extremidades do sistema.

As auto-energias variam com o campo aplicado. Para efetuar uma transição entre auto-estados é necessário que um portador emita ou absorva uma quantidade de energia, cuja frequência é determinada por $\nu_{uv} = (\Delta\epsilon_{uv})/h$, onde h representa a constante de Planck e $\Delta\epsilon_{uv}$ a diferença entre os auto-estados u e v . Para um determinado valor de campo, estes níveis entrarão em ressonância quando a aproximação entre os níveis atingir seu valor mínimo. Nesta condição, os auto-estados se modificam fortemente, possuindo um grau de delocalização bem maior do que os níveis não ressonantes. Assim teremos funções localizadas (níveis não ressonantes) e delocalizadas (níveis ressonantes) numa mesma estrutura. Dipolos elétricos oscilantes ocorrem caso haja ressonância numa das bandas e nas outras os auto-estados continuam localizados. Estas oscilações se processam somente para valores bastante específicos de campo, desaparecendo rapidamente mesmo para valores de campo próximos da ressonância. Através da derivada temporal dos valores esperados da posição conseguem-se as velocidades e acelerações. Pelo fato das separação entre os níveis depender da massa efetiva do portador, as ressonâncias de buracos pesados são as primeiras a acontecer, seguidas das de buracos leves e eletrônicas. Nas primeiras ressonâncias, a aproximação *Tight-Binding* (níveis em ressonância independentes dos demais) não é muito boa pois as auto-funções ainda são bastante delocalizadas e suas interações com estados próximos bastante evidente. Ressonâncias a campos maiores produzem melhores resultados com relação à

esta aproximação. Pela varredura efetuada, concluímos que a separação mínima dos níveis aumenta com o valor do campo aplicado. Como os auto-estados de energia mais alta são os que necessitam de um valor de campo maior, estes níveis apresentarão uma distância mínima superior à dos estados de energias mais baixas.

O estudo da dinâmica dos portadores pode ser feita pela confecção de pacotes de onda de auto-estados do sistema. O número de auto-estados pode variar, dependendo do pacote que se deseja construir. Uma maneira de produzir estes pacotes é a utilização de um *laser* com frequência e largura específicas, de modo a provocar a transição de elétrons da banda de valência para a de condução. Para cada dos portadores construímos um pacote formado pela soma dos três primeiros auto-estados e outro resultante da adição dos quatro primeiros. Todos os pacotes foram normalizados e propagados a campos de 30 e 90 kV/cm (valores de campos moderados e fortes, respectivamente). Devido à esta construção, a evolução temporal do sistema adquire um caráter oscilatório não periódico. Isto foi verificado para os valores esperados da posição, do potencial, da velocidade, além da amplitude de correlação dos pacotes.

Em trabalhos futuros, é de nossa intenção a investigação das escadas Wannier-Stark, estados de Tamm, ressonâncias entre auto-estados e tunelamentos induzido pelo campo para valores de temperatura e concentração de alumínio diferentes do estabelecido neste trabalho. Isto será feito utilizando-se expressões escritas na tabela II, resultado de uma interpolação linear das fórmulas escritas por L. Hrivnák, no ponto Γ da zona de Brillouin.

Tabela 7.1 - Expressões Gerais das Massas Efetivas dos Portadores, via Interpolação Linear das fórmulas escritas por L. Hrivnák, para o Ponto " Γ ". Nesta tabela m_e^* , m_{lh}^* e m_{hh}^* representam respectivamente as massas efetivas do elétron, buraco leve e buraco pesado. Já o m_0 representa a massa do elétron livre no vácuo, cujo valor é igual a 56,86 meV.(fs/angstrom)².

$m_e^*(x, T)/m_0 = (0,06652 - 0,00001T) + (0,1007 - 0,00005T)x + (0,01364 + 0,00003T)x^2$
$m_{lh}^*(x, T)/m_0 = (0,09415 - 0,00002T) + (0,0394 - 0,0011T)x + (0,00966 + 0,00002T)x^2$
$m_{hh}^*(x, T)/m_0 = (0,54235 - 0,00014T) + (0,2246 + 0,0063T)x + (0,05506 + 0,00014T)x^2$

Destas expressões, percebe-se que quanto maior for a temperatura T e concentração de alumínio x no sistema, maiores serão as massas efetivas. Para a temperatura, isto acontece devido ao aumento do número de colisões e espalhamentos. Em relação à concentração x , o crescimento é devido ao fato do alumínio ser mais eletronegativo que o gálio, aumentando as interações coulombianas do sistema.

a) Massa Efetiva dos Elétron da Banda de Condução

b) Massa Efetiva dos Buracos Leves e Pesados da Banda de Valência

Fig 7.1 - Gráficos das massas efetivas dos portadores em função da concentração de alumínio x e da temperatura T (expressões contidas na tabela 7.1).

APÊNDICE A

FÓRMULA DE GLAUBER

O objetivo deste apêndice é deduzir a fórmula de Glauber, que faz o processo de separação de três operadores distintos $A+B+C$ situados num mesmo expoente para expoentes diferentes. Depois será discutido o limite em que $A=C$, mas A e B não comutam com $[A,B]$, que é o caso do Hamiltoniano utilizado no método do Split-Operator. Muito cuidado deve ser tomado com relação às ordens de aparição destes operadores. Isto é justificado pois suas ordens são relevantes, a menos que eles comutem^[66].

$$\exp(A).\exp(B).\exp(C) \neq \exp(A+B+C) \rightarrow \sum_{n,m,r=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!} \frac{B^m}{m!} \frac{C^r}{r!} \neq \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(A+B+C)^n}{n!} \quad (A.01)$$

Caso os operadores comutem com seus comutadores, eles obedecerão às propriedades enunciadas na tabela A.1.

Tabela A.1 - Propriedades que os operadores A , B e C que estão dispostos em exponenciais devem possuir para se obter a fórmula de Glauber.

Hipótese:
$$\left[\begin{array}{lll} [A, [A, B]] = 0 & [B, [B, C]] = 0 & [A^n, B] = nA^{n-1}[A, B] \\ [A, [A, C]] = 0 & [C, [A, C]] = 0 & [A^n, C] = nA^{n-1}[A, C] \\ [B, [A, B]] = 0 & [C, [B, C]] = 0 & [B^n, C] = nB^{n-1}[B, C] \end{array} \right], \text{ então}$$

$\begin{aligned} [\exp(At), B] \exp(-At) &= [A, B].t & \exp(At).B.\exp(-At) &= B + [A, B].t \\ [\exp(At), C] \exp(-At) &= [A, C].t & \exp(At).C.\exp(-At) &= C + [A, C].t \\ [\exp(Bt), C] \exp(-Bt) &= [B, C].t & \exp(Bt).C.\exp(-Bt) &= C + [B, C].t \\ \exp(At).\exp(Bt).C.\exp(-Bt).\exp(-At) &= C + \{[A, C] + [B, C]\}.t + [A, [B, C]].t^2 + [[A, B], [A, C]].t^3 \end{aligned}$

A Fórmula de Glauber é obtida da derivada temporal da função $F(t) = \exp(At).\exp(Bt).\exp(Ct)$. Assim

$$\frac{\partial F(t)}{\partial t} = [A + \exp(At).B.\exp(-At) + \exp(At).\exp(Bt).C.\exp(-At).\exp(-Bt)].F(t) \quad (A.02)$$

Utilizando as propriedades da tabela A.1, as exponenciais são permutadas pelos comutadores de A , B e C ,

$$\frac{\partial F(t)}{\partial t} = [A + B + [A, B].t + C + [A, C].t + [B, C].t + [A, [B, C]].t^2 + [[A, B], [A, C]].t^3].F(t) \quad (A.03)$$

Através de sua posterior integração, a fórmula de Glauber para três operadores distintos entre si resulta na expressão:

$$F(t) = F(0). \exp \left[(A+B+C)t + ([A, B] + [A, C] + [B, C]) \frac{t^2}{2} + [A, [B, C]] \frac{t^3}{3} + [[A, B], [A, C]] \frac{t^4}{4} \right] \quad (A.04)$$

Ao se aplicar esta fórmula no Hamiltoniano do sistema, verificamos que $A=C=V(r,t)/2\hbar$, fato este que leva os termos de ordens superiores a t se anularem. Sendo a constante $F(0)=1$ por comparações entre os dois resultados, temos:

$$F(t) = \exp(At) \cdot \exp(Bt) \cdot \exp(At) = F(0) \cdot \exp[(A+B+A)t] \quad (A.05)$$

Este é o motivo pelo qual decompomos $H(r,t) = V(r,t)/2 + P(r)^2/2m_n^* + V(r,t)/2$. Como $B = P(r)^2/2m_n^*\hbar$ e $[A,B] = \frac{-\Delta t^2}{4m_n^*\hbar^2} [V(r,t), P^2(r)]$, a fórmula (A.04) é válida desde que

$$[A, [A,B]] = \frac{i\Delta t^3}{8m_n^*\hbar^3} [V(r,t), [V(r,t), P^2(r)]] = 0 \quad (A.06)$$

$$[B, [A,B]] = \frac{i\Delta t^3}{8m_n^{*2}\hbar^3} [P^2(r), [V(r,t), P^2(r)]] = 0$$

Como, a princípio, estes comutadores são diferentes de zero, (A.05) pode ser usada se os termos de $[A, [A,B]]$ e $[B, [A,B]]$ forem desprezíveis. No limite em que $\Delta t \rightarrow 0$, esta aproximação resulta num erro tolerável. Caso contrário, haverá divergência numérica. Uma estimativa do valor deste intervalo temporal pode ser obtido pelo princípio da incerteza de Heisenberg $\Delta t \cdot \Delta E \approx \hbar$ (ΔE representa o menor intervalo de energia possível necessário para acomodar todo o espectro associado aos auto-estados do sistema). Normalmente este valor é da ordem de $0,1 \cdot 10^{-15}$ segundos. em nossos cálculos.

APÊNDICE B

APROXIMAÇÃO DA ENERGIA CINÉTICA

Este apêndice visa detalhar a aproximação feita no termo da energia cinética e como isto não afeta o módulo da função de onda propagada. Definindo o operador $\mathbf{K}(\mathbf{r}) = -i\mathbf{P}(\mathbf{r})^2/2\hbar m_n^*$, a expansão da exponencial contendo este termo é dada por:

$$\exp\left(\frac{-i\Delta t \mathbf{P}(\mathbf{r})^2}{2\hbar m_n^*}\right) = \exp(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r})) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^n}{n!} = 1 + (\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r})) + \frac{1}{2!}(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^2 + \frac{1}{3!}(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^3 + \frac{1}{4!}(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^4 \dots \quad (\text{B.01})$$

No limite $\Delta t \rightarrow 0$, quanto maior for a potência de Δt , menor é a sua importância para o sistema. Colocando os dois primeiros termos em evidência, podemos escrever:

$$\exp(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r})) = \left[1 + \frac{(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))}{2}\right] \left[1 + \frac{(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))}{2} + \frac{(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^2}{4}\right] + \frac{(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^3}{24} + \sum_{j=4}^{\infty} \frac{(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^j}{j!} \quad (\text{B.02})$$

O termo contido no segundo parênteses é idêntico até segunda ordem da expansão de $1/(1 - \Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r})/2)$. Isto nos convida a permuta destes dois termos. Sendo $1 + (\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))/2 + (\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^2/4 = [1 - (\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))/2]^{-1} - (\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^3/8 - \sum_{j=4}^{\infty} (\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^j/2^j$, (B.02) pode ser reduzida a

$$\exp(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r})) = \left[1 - \frac{(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))}{2}\right]^{-1} \left[1 + \frac{(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))}{2}\right] - \frac{(\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^3}{12} + \sum_{j=4}^{\infty} \left(\frac{1}{j!} - \frac{1}{2^j}\right) (\Delta t \mathbf{K}(\mathbf{r}))^j \quad (\text{B.03})$$

de modo que termos de ordens superiores a Δt^2 possam ser desprezados. Todo este desenvolvimento foi necessário pelo fato que a simples expansão do somatório das exponenciais em $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ não conservar a norma da função de onda. Assim, efetuou-se uma expansão de modo a torná-la unitária e ao mesmo tempo simples de ser implementada. O operador evolução temporal $\underline{U}(t+\Delta t, t)$, que leva a função de onda $|\Psi_n(\mathbf{r}, t)\rangle$ em $|\Psi_n(\mathbf{r}, t+\Delta t)\rangle$ através da relação $|\Psi_n(\mathbf{r}, t+\Delta t)\rangle = \underline{U}(t+\Delta t, t) \cdot |\Psi_n(\mathbf{r}, t)\rangle$ possui a seguinte formulação:

$$\underline{U}(t+\Delta t, t) = \exp\left[\frac{iV_t \Delta t}{2\hbar}\right] \left[1 + \frac{i\Delta t}{4\hbar m_n^*} \mathbf{P}(\mathbf{r})^2\right]^{-1} \left[1 - \frac{i\Delta t}{4\hbar m_n^*} \mathbf{P}(\mathbf{r})^2\right] \exp\left[\frac{iV_t \Delta t}{2\hbar}\right] \quad (\text{B.04})$$

sendo (B.04) a expressão adequada a ser usada no Split-Operator.

APÊNDICE C

ALGORITMO DE THOMAS

Este apêndice tem por finalidade determinar as relações de recorrência utilizadas no método do Split-Operator necessárias à resolução de matrizes tridiagonais. Elas aparecem nas exponenciais da energia cinética, de modo que sendo $\mathbf{P}^2(\mathbf{r}) = -\hbar^2 \nabla^2$, a expressão (1.07) torna-se:

$$\left[1 - \frac{i\Delta t \hbar^2}{4\hbar m_n^*} \nabla^2\right] |\varphi_n(\mathbf{r}, t)\rangle = \left[1 + \frac{i\Delta t \hbar^2}{4\hbar m_n^*} \nabla^2\right] |\Phi_n(\mathbf{r}, t)\rangle \quad (\text{C.01})$$

onde o laplaciano ∇^2 , representa as derivadas parciais de segunda ordem (no caso particular de coordenadas cartesianas unidimensionais, $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2$). Em termos de discretização computacional, estas derivadas indicam a necessidade de se levar em conta os vizinhos mais próximos, quaisquer que sejam os pontos considerados.

Seja $|\beta_n(\mathbf{x}, t)\rangle = \left[1 - (i\Delta t/4\hbar m_n^*) \cdot (\partial^2/\partial x^2)\right] \cdot |\Phi_n(\mathbf{x}, t)\rangle$ a expressão resultante do lado direito de (C.01). Utilizando a discretização não uniforme para a derivada espacial, temos que $|\beta_n(j, t)\rangle = a x_j \cdot |\Phi_n(j-1, t)\rangle + (1 - b x_j) \cdot |\Phi_n(j, t)\rangle + c x_j \cdot |\Phi_n(j+1, t)\rangle$, onde

$$a x_j = \frac{-i\Delta t}{2\hbar m_n^* (\Delta x_{j-1} [\Delta x_j + \Delta x_{j-1}])}, \quad b x_j = \frac{-i\Delta t}{2\hbar m_n^* [\Delta x_j \cdot \Delta x_{j-1}]}, \quad e \quad c x_j = \frac{-i\Delta t}{2\hbar m_n^* (\Delta x_j [\Delta x_j + \Delta x_{j-1}])} \quad (\text{C.02})$$

assumindo o seguinte equacionamento:

$$\begin{pmatrix} \beta_n(x_1, t) \\ \beta_n(x_2, t) \\ \beta_n(x_3, t) \\ \vdots \\ \beta_n(x_{N-1}, t) \\ \beta_n(x_N, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1-bx_1 & -ax_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -ax_2 & 1-bx_2 & -ax_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -ax_3 & 1-bx_3 & -ax_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -ax_{N-1} & 1-bx_{N-1} & -ax_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -ax_N & 1-bx_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_n(x_1, t) \\ \Phi_n(x_2, t) \\ \Phi_n(x_3, t) \\ \vdots \\ \Phi_n(x_{N-1}, t) \\ \Phi_n(x_N, t) \end{pmatrix} \quad (\text{C.03})$$

Esta equação não apresenta nenhum problema para sua resolução, uma vez que a matriz tridiagonal está multiplicando $|\Phi_n(x_j, t)\rangle$, que é uma grandeza conhecida de antemão. A complicação surge no lado esquerdo de (C.01), determinado por $\left[1 + (i\Delta t/4\hbar m_n^*) \cdot (\partial^2/\partial x^2)\right] \cdot |\Phi_n(\mathbf{x}, t)\rangle = |\beta_n(\mathbf{x}, t)\rangle$, pois a matriz tridiagonal está agora multiplicando $|\phi_n(\mathbf{x}, t)\rangle$, que ainda deve ser determinada.

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1-bx_1 & -ax_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -ax_2 & 1-bx_2 & -ax_2 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -ax_3 & 1-bx_3 & -ax_3 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & -ax_{N-1} & 1-bx_{N-1} & -ax_{N-1} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -ax_N & 1-bx_N \end{pmatrix}}_{\text{desconhecido}} \begin{pmatrix} \varphi_n(x_1, t) \\ \varphi_n(x_2, t) \\ \varphi_n(x_3, t) \\ \vdots \\ \varphi_n(x_{N-1}, t) \\ \varphi_n(x_N, t) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \beta_n(x_1, t) \\ \beta_n(x_2, t) \\ \beta_n(x_3, t) \\ \vdots \\ \beta_n(x_{N-1}, t) \\ \beta_n(x_N, t) \end{pmatrix} \quad (\text{C.04})$$

Definindo $dx_i = 1 - bx_i$, o sistema linear que aparece multiplicando as matrizes da parte desconhecida é dada por:

$$\begin{cases} dx_1\varphi(x_1,t) & -cx_1\varphi(x_2,t) & +0 & +0 & \dots & +0 & +0 & +0 & = \beta(x_1,t) \\ -cx_2\varphi(x_1,t) & +dx_2\varphi(x_2,t) & -cx_2\varphi(x_3,t) & +0 & \dots & +0 & +0 & +0 & = \beta(x_2,t) \\ 0 & -cx_3\varphi(x_2,t) & +dx_3\varphi(x_3,t) & -cx_3\varphi(x_4,t) & \dots & +0 & +0 & +0 & = \beta(x_3,t) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & +0 & +0 & +0 & \dots & -cx_{N-1}\varphi(x_{N-2},t) & +dx_{N-1}\varphi(x_{N-1},t) & -cx_{N-1}\varphi(x_N,t) & = \beta(x_{N-1},t) \\ 0 & +0 & +0 & +0 & \dots & +0 & -cx_N\varphi(x_{N-1},t) & +dx_N\varphi(x_N,t) & = \beta(x_N,t) \end{cases} \quad (C.05)$$

A função $|\varphi_n(x_i,t)\rangle$ esta relacionada com $|\varphi_n(x_{i-1},t)\rangle$ e $|\varphi_n(x_{i+1},t)\rangle$ que são seus vizinhos mais próximos. Desta maneira, esta função no ponto x_i pode ser solucionada se soubermos qual é o valor de $|\varphi_n(x_{i+1},t)\rangle$, pois

$$\varphi(x_1,t) = \left(\frac{\beta(x_1,t) + cx_1\varphi(x_2,t)}{dx_1} \right) ; \quad \varphi(x_2,t) = \left(\frac{\beta(x_2,t) + \frac{cx_2\gamma_1}{dx_1} + cx_3\varphi(x_3,t)}{dx_2 - \frac{cx_2cx_1}{dx_1}} \right) ; \dots \quad (C.06)$$

Neste ponto do tratamento, é de grande utilidade a introdução das grandezas v_i e ρ_i , úteis à simplificação do sistema linear anterior, definidas por^[67,68]:

$$\begin{cases} v_1 = dx_1 ; v_2 = dx_2 + \frac{cx_2cx_1}{v_1} ; \dots ; v_N = dx_N + \frac{cx_Ncx_{N-1}}{v_{N-1}} \\ \rho_1 = \beta(x_1,t) ; \rho_2 = \beta(x_2,t) - \frac{cx_2\rho_1}{v_1} ; \dots ; \rho_N = \beta(x_N,t) - \frac{cx_N\rho_{N-1}}{v_{N-1}} \end{cases} \quad (C.07)$$

possibilitando escrevermos (C.05) sob a forma:

$$\begin{cases} v_1\varphi(x_1,t) & -cx_1\varphi(x_2,t) & +0 & +0 & \dots & +0 & +0 & +0 & = \rho_1 \\ 0 & +v_2\varphi(x_2,t) & -cx_2\varphi(x_3,t) & +0 & \dots & +0 & +0 & +0 & = \rho_2 \\ 0 & +0 & +v_3\varphi(x_3,t) & -cx_3\varphi(x_4,t) & \dots & +0 & +0 & +0 & = \rho_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & +0 & +0 & +0 & \dots & +0 & +v_{N-1}\varphi(x_{N-1},t) & -cx_{N-1}\varphi(x_N,t) & = \rho_{N-1} \\ 0 & +0 & +0 & +0 & \dots & +0 & +0 & +v_N\varphi(x_N,t) & = \rho_N \end{cases} \quad (C.08)$$

Uma vez nesta configuração, $|\varphi_n(x,t)\rangle$ é determinado por uma relação de recorrência inversa, começando do N-ésimo ponto e voltando até ser atingido o primeiro. Assim:

$$\left\{ \varphi(x_N,t) = \left(\frac{\rho_N}{v_1} \right) ; \varphi(x_{N-1},t) = \left(\frac{\rho_{N-1} + cx_{N-1}\varphi(x_N,t)}{v_{N-1}} \right) ; \dots ; \varphi(x_{N-S},t) = \left(\frac{\rho_{N-S} + cx_{N-S}\varphi(x_{N-S+1},t)}{v_{N-S}} \right) (S=1,2,3,\dots,N-1) \right. \quad (C.07)$$

Cumprе ressaltar que este procedimento deve ser efetuado também para todas as outras componentes do sistema, caso o laplaciano seja bi ou tridimensional.

APÊNDICE D

DISPERSÃO DE UMA SUPER-REDE

Este apêndice visa à dedução fórmula das energias de uma super-rede de poços quânticos idênticos não dopada. O Hamiltoniano total $\mathbf{H}$ é usualmente separado numa soma do Hamiltoniano de um poço isolado H^0 mais um termo ΔU referente aos outros poços do sistema:

$$\mathbf{H}|\Psi_n(x)\rangle = \underbrace{\left(\frac{\mathbf{P}^2(\mathbf{x})}{2m_n^*} + V_0 \cdot \mathfrak{R}(x-d)\right)}_{=H^0} \cdot |\Psi_n(x)\rangle + \underbrace{\left(V_0 \cdot \sum_{\substack{j=-N \\ j \neq 0}}^N \mathfrak{R}(x-jd)\right)}_{=\Delta U} \cdot |\Psi_n(x)\rangle = \varepsilon_n \cdot |\Psi_n(x)\rangle \quad (\text{G.01})$$

Por (2.03), expandimos $|\Psi_n(x)\rangle$ numa base ortonormal de auto-funções de poços isolados $|\varpi(x+jd)\rangle$. Através da decomposição do Hamiltoniano total $\mathbf{H}$ na soma do Hamiltoniano de poço isolado H^0 mais o ΔU referente à existência de outros poços, a equação $\mathbf{H}|\Psi_n(x)\rangle = (H^0 + \Delta U) \cdot |\Psi_n(x)\rangle = \varepsilon_n \cdot |\Psi_n(x)\rangle$ ficará

$$\sum_{j=-N}^N b_{jj} \exp(ikjd) \cdot \{H^0 + \Delta U - \varepsilon_j\} |\varpi(x+jd)\rangle = 0 \quad (\text{G.02})$$

como $|\varpi(x+jd)\rangle$ é auto-estado de $H^0(x+jd)$, as auto-energias ε_j^0 do poço isolado podem ser conseguidas através da aplicação da equação de Schrödinger independente do tempo. A expressão geral das auto-energias deste sistema, será encontrado pela multiplicação de $\langle \varpi(x)|$, com o uso das seguintes definições

$$\begin{cases} H^0 |\varpi(x+jd)\rangle = \varepsilon_j^0 \cdot |\varpi(x+jd)\rangle & ; \quad \alpha_{jj}(jd) = \langle \varpi(x) | \varpi(x+jd) \rangle \\ \beta_{jj} = \langle \varpi(x) | \Delta U | \varpi(x) \rangle & ; \quad \gamma_{jj}(jd) = \langle \varpi(x) | \Delta U | \varpi(x+jd) \rangle \end{cases} \quad (\text{G.03})$$

onde α_{jj} e γ_{jj} são termos que contém o overlap de $|\varpi(x+jd)\rangle$ situados em níveis e sítios diferentes^[69]. Já β_{jj} representa a alteração pelo acoplamento ΔU do caráter local das auto-funções de poços isolados. Desta forma,

$$(\varepsilon_n - \varepsilon_n^0) b_{nn} = b_{nn} \beta_{nn}(nd) + \sum_{q=-N}^N b_{nn} \exp(iqkd) [(\delta_{n0} - 1) \cdot (\varepsilon_n - \varepsilon_n^0) \cdot \alpha_{nn}(qd) + \gamma_{nn}(qd)] \quad (\text{G.04})$$

Existem certas propriedades de simetria neste sistema ($\Delta U(-x) = \Delta U(x)$, $\alpha_{nn}(-x) = \alpha_{nn}(x)$ e $\gamma_{nn}(-x) = \gamma_{nn}(x)$), de modo que as exponenciais contidas no interior das somatórias podem ser transformadas na função cosseno. No limite em que $\alpha_{nn}(x)$, β_{nn} e $\gamma_{nn}(x)$ sejam iguais a zero para $r \neq j$, obtemos a relação de dispersão comumente encontradas na literatura^[70,71,72],

$$\varepsilon_n = \varepsilon_n^0 + \beta_{nn} + 2 \sum_{q=0}^N \cos(qkd) \gamma_{nn}(qd) \quad (\text{G.06})$$

que será utilizada em nossas investigações sobre largura de mini-bandas e da distância delas a um estado localizado num poço quântico mais largo (estado de Tamm).

APÊNDICE E

SISTEMA DE MEDIDAS

Através da ordem dos parâmetros envolvidos no cálculo das auto-funções, auto-energias e valores esperados nos sistemas propostos, convencionou-se adotar como unidades fundamentais as seguintes grandezas^[73]:

- A) **Comprimento:** Angstrom (a) = 1.10^{-10} metros.
B) **Tempo:** femtosegundo (fmts) = 1.10^{-15} segundos.
C) **Energia:** milielétron-Volt (meV) = $1/(1,6242 \cdot 10^{21})$ Joules.
D) **Temperatura:** grau Kelvin (K).
E) **Carga Elétrica:** carga do elétron (q) = $1,6.10^{-19}$ Coulombs.

Deste modo, todas as grandezas que aparecerem nos cálculos devem necessariamente passar para este sistema de coordenadas. Abaixo está listada algumas das mais importantes:

a) Constante de Planck ($\hbar$):

$$\hbar = 658,1743 \text{ meV.fmts}$$

b) Massa do Elétron em Repouso no Vácuo (m_0):

$$m_0 = 9,1083.10^{-31} \text{ Kg} = 56,854009 \text{ meV.fmts}^2/\text{a}^2$$

c) Constante de Boltzmann (k_b):

$$k_b = 1,38044.10^{23} \text{ J/K} = 0,0861671 \text{ meV/K}$$

d) Permissividade do Vácuo (ϵ_0):

$$\epsilon_0 = 8,85415.10^{-12} \text{ C}^2/(\text{J.m}) = 5,5409361.10^{-6} \text{ q}^2/(\text{meV.a})$$

e) Raio de Bohr (a_0):

$$a_0 = (\hbar \cdot \epsilon_0)/(q^2 m_0) = 5,29172.10^{-11} \text{ m} = 0,529172 \text{ a}$$

APÊNDICE F

TABELAS DE VALORES DOS AUTO-ESTADOS

Neste apêndice são fornecidas tabelas comparativas dos valores dos auto-estados e valores esperados da posição, potencial dos sistemas que foram simulados usando a técnica do Split-Operator. Dividiremos as tabelas em capítulos para melhor compreensão desta sequência.

• CAPÍTULO 2: SUPER-REDES NÃO DOPADAS

Tabela F.1- Valores numéricos das auto-energias para a mini-banda de elétrons, buracos leves e pesados ($T = 0$ Kelvin) de uma Super-Rede de $\text{Al}_{0.20}\text{Ga}_{0.80}\text{As}/\text{GaAs}$ com 3, 5, 7 e 9 poços de 40 angstroms cada um, separados por barreiras de 15 angstroms de espessura.

a) Elétrons da Banda de Condução				
Auto-Estados	3 poços (meV)	5 poços (meV)	7 poços (meV)	9 poços (meV)
$ \Psi_1(x)\rangle_{el}$	-229.26	-235.15	-237.18	-238.08
$ \Psi_2(x)\rangle_{el}$	-199.64	-221.83	-229.75	-233.34
$ \Psi_3(x)\rangle_{el}$	-158.27	-200.56	-217.58	-225.53
$ \Psi_4(x)\rangle_{el}$	-	-173.45	-201.10	-214.79
$ \Psi_5(x)\rangle_{el}$	-	-146.19	-181.20	-201.37
$ \Psi_6(x)\rangle_{el}$	-	-	-159.76	-185.71
$ \Psi_7(x)\rangle_{el}$	-	-	-141.08	-168.65
$ \Psi_8(x)\rangle_{el}$	-	-	-	-151.82
$ \Psi_9(x)\rangle_{el}$	-	-	-	-138.33

b) Buracos Leves da Banda de Valência				
Auto-Estados	3 poços (meV)	5 poços (meV)	7 poços (meV)	9 poços (meV)
$ \Psi_1(x)\rangle_{lh}$	-1853.24	-1852.34	-1851.73	-1851.03
$ \Psi_2(x)\rangle_{lh}$	-1863.54	-1860.46	-1857.47	-1854.68
$ \Psi_3(x)\rangle_{lh}$	-1880.16	-1870.66	-1866.91	-1860.73
$ \Psi_4(x)\rangle_{lh}$	-	-1882.84	-1879.84	-1869.11
$ \Psi_5(x)\rangle_{lh}$	-	-1896.94	-1895.76	-1879.66
$ \Psi_6(x)\rangle_{lh}$	-	-	-1930.42	-1892.16
$ \Psi_7(x)\rangle_{lh}$	-	-	-1913.59	-1906.13
$ \Psi_8(x)\rangle_{lh}$	-	-	-	-1925.56
$ \Psi_9(x)\rangle_{lh}$	-	-	-	-1933.03

c) Buracos Pesados da Banda de Valência				
Auto-Estados	3 poços (meV)	5 poços (meV)	7 poços (meV)	9 poços (meV)
$ \Psi_1(x)\rangle_{hh}$	-1832.15	-1831.37	-1831.08	-1830.95
$ \Psi_2(x)\rangle_{hh}$	-1835.84	-1833.16	-1832.10	-1831.61
$ \Psi_3(x)\rangle_{hh}$	-1839.95	-1835.79	-1833.69	-1832.66
$ \Psi_4(x)\rangle_{hh}$	-	-1838.65	-1835.70	-1834.05
$ \Psi_5(x)\rangle_{hh}$	-	-1840.92	-1837.87	-1835.67
$ \Psi_6(x)\rangle_{hh}$	-	-	-1839.97	-1837.41
$ \Psi_7(x)\rangle_{hh}$	-	-	-1841.28	-1839.09
$ \Psi_8(x)\rangle_{hh}$	-	-	-	-1840.51
$ \Psi_9(x)\rangle_{hh}$	-	-	-	-1841.46

Tabela F.2- Valores Esperados do Potencial para a mini-banda de elétrons, buracos leves e pesados (T= 0 Kelvin) de uma Super-Rede de $\text{Al}_{0.20}\text{Ga}_{0.80}\text{As}/\text{GaAs}$ com 3, 5, 7 e 9 poços de 40 angstroms cada um, separados por barreiras de 15 angstroms de espessura.

a) Elétrons da Banda de Condução

Auto-Estados	3 poços (meV)	5 poços (meV)	7 poços (meV)	9 poços (meV)
$ \Psi_1(x)\rangle_e$	-280.42	-279.44	-279.33	-279.20
$ \Psi_2(x)\rangle_e$	-286.17	-281.16	-280.48	-279.92
$ \Psi_3(x)\rangle_e$	-301.71	-285.17	-282.65	-281.23
$ \Psi_4(x)\rangle_e$	-	-293.60	-286.26	-283.26
$ \Psi_5(x)\rangle_e$	-	-308.97	-292.12	-286.29
$ \Psi_6(x)\rangle_e$	-	-	-301.34	-290.72
$ \Psi_7(x)\rangle_e$	-	-	-313.72	-297.14
$ \Psi_8(x)\rangle_e$	-	-	-	-306.00
$ \Psi_9(x)\rangle_e$	-	-	-	-316.02

b) Buracos Leves da Banda de Valência

Auto-Estados	3 poços (meV)	5 poços (meV)	7 poços (meV)	9 poços (meV)
$ \Psi_1(x)\rangle_{lh}$	-1842.43	-1842.67	-1842.65	-1842.70
$ \Psi_2(x)\rangle_{lh}$	-1840.50	-1842.14	-1842.19	-1842.39
$ \Psi_3(x)\rangle_{lh}$	-1832.38	-1840.59	-1841.28	-1841.83
$ \Psi_4(x)\rangle_{lh}$	-	-1836.43	-1839.66	-1840.92
$ \Psi_5(x)\rangle_{lh}$	-	-1825.99	-1836.73	-1839.49
$ \Psi_6(x)\rangle_{lh}$	-	-	-1831.26	-1837.25
$ \Psi_7(x)\rangle_{lh}$	-	-	-1821.50	-1833.64
$ \Psi_8(x)\rangle_{lh}$	-	-	-	-1827.73
$ \Psi_9(x)\rangle_{lh}$	-	-	-	-1819.10

c) Buracos Pesados da Banda de Valência

Auto-Estados	3 poços (meV)	5 poços (meV)	7 poços (meV)	9 poços (meV)
$ \Psi_1(x)\rangle_{hh}$	-1821.59	-1822.32	-1822.44	-1822.54
$ \Psi_2(x)\rangle_{hh}$	-1818.39	-1821.11	-1821.67	-1822.05
$ \Psi_3(x)\rangle_{hh}$	-1814.11	-1818.99	-1820.37	-1821.23
$ \Psi_4(x)\rangle_{hh}$	-	-1816.08	-1818.59	-1820.08
$ \Psi_5(x)\rangle_{hh}$	-	-1813.20	-1816.46	-1818.63
$ \Psi_6(x)\rangle_{hh}$	-	-	-1814.29	-1816.95
$ \Psi_7(x)\rangle_{hh}$	-	-	-1812.59	-1815.17
$ \Psi_8(x)\rangle_{hh}$	-	-	-	-1813.54
$ \Psi_9(x)\rangle_{hh}$	-	-	-	-1812.37

Tabela F.3- Desvio Padrão da Posição para a mini-banda de elétrons, buracos leves e pesados ($T=0$ Kelvin) de uma Super-Rede de $\text{Al}_{0.20}\text{Ga}_{0.80}\text{As}/\text{GaAs}$ com 3, 5, 7 e 9 poços de 40 angstroms cada um, separados por barreiras de 15 angstroms de espessura.

a) Elétrons da Banda de Condução

Auto-Estados	3 poços (Angstroms)	5 poços (Angstroms)	7 poços (Angstroms)	9 poços (Angstroms)
$ \Psi_1(x)\rangle_e$	38.29	58.07	77.83	97.65
$ \Psi_2(x)\rangle_e$	55.97	85.60	114.56	143.68
$ \Psi_3(x)\rangle_e$	46.62	90.15	120.46	150.90
$ \Psi_4(x)\rangle_e$	-	90.41	122.75	153.61
$ \Psi_5(x)\rangle_e$	-	68.28	123.67	155.12
$ \Psi_6(x)\rangle_e$	-	-	121.42	156.04
$ \Psi_7(x)\rangle_e$	-	-	88.23	155.94
$ \Psi_8(x)\rangle_e$	-	-	-	151.74
$ \Psi_9(x)\rangle_e$	-	-	-	107.92

b) Buracos Leves da Banda de Valência

Auto-Estados	3 poços (Angstroms)	5 poços (Angstroms)	7 poços (Angstroms)	9 poços (Angstroms)
$ \Psi_1(x)\rangle_h$	38.56	58.39	78.13	97.96
$ \Psi_2(x)\rangle_h$	56.54	86.08	115.01	144.14
$ \Psi_3(x)\rangle_h$	49.61	90.64	120.90	151.36
$ \Psi_4(x)\rangle_h$	-	91.12	123.17	154.05
$ \Psi_5(x)\rangle_h$	-	71.75	124.10	155.52
$ \Psi_6(x)\rangle_h$	-	-	122.13	156.40
$ \Psi_7(x)\rangle_h$	-	-	91.58	156.36
$ \Psi_8(x)\rangle_h$	-	-	-	152.42
$ \Psi_9(x)\rangle_h$	-	-	-	110.98

c) Buracos Pesados da Banda de Valência

Auto-Estados	3 poços (Angstroms)	5 poços (Angstroms)	7 poços (Angstroms)	9 poços (Angstroms)
$ \Psi_1(x)\rangle_{hh}$	38.71	58.19	78.44	99.66
$ \Psi_2(x)\rangle_{hh}$	55.78	85.68	114.95	146.24
$ \Psi_3(x)\rangle_{hh}$	42.13	90.14	120.86	153.16
$ \Psi_4(x)\rangle_{hh}$	-	89.46	123.02	155.24
$ \Psi_5(x)\rangle_{hh}$	-	63.22	123.38	155.77
$ \Psi_6(x)\rangle_{hh}$	-	-	119.61	155.27
$ \Psi_7(x)\rangle_{hh}$	-	-	82.94	153.21
$ \Psi_8(x)\rangle_{hh}$	-	-	-	146.32
$ \Psi_9(x)\rangle_{hh}$	-	-	-	99.72

• CAPÍTULO 3: ESTADOS DE SUPERFÍCIE

Tabela F.4 - Energia dos Estados de Tamm para os elétrons da Banda de Condução e Buracos Leves e Pesados da Banda de Valência a $T=0$ K, quando variamos o poço mais largo em 2, 3, 4 e até 5 vezes o tamanho de um poço comum de 40 angstroms de comprimento, que forma a Super-Rede de $\text{Al}_{0.20}\text{Ga}_{0.80}\text{As}/\text{GaAs}$.

Poço Largo (Angstroms)	$\langle V(x) \rangle$ - Tamm-State 1 (meV)			$\langle V(x) \rangle$ - Tamm-State 2 (meV)			$\langle V(x) \rangle$ - Tamm-State 3 (meV)		
	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados
80	-278.40	-1833.65	-1811.92	-135.77	-1924.49	-1847.10	-	-1997.31	-1903.24
120	-302.79	-1818.20	-1805.97	-223.62	-1869.58	-1823.78	-102.63	-1903.34	-1853.11
160	-313.29	-1811.33	-1803.57	-263.94	-1844.65	-1814.26	-183.75	-1878.50	-1831.99
200	-318.72	-1807.72	-1802.43	-285.15	-1830.65	-1809.93	-230.45	-1867.71	-1823.98

Tabela F.5 - Valores Esperados do Potencial dos Estados de Tamm para os elétrons da Banda de Condução e Buracos Leves e Pesados da Banda de Valência a $T = 0K$, quando variamos o poço mais largo em 2, 3, 4 e até 5 vezes o tamanho de um poço comum de 40 angstroms de comprimento, que forma a Super-Rede de $Al_{0.20}Ga_{0.80}As/GaAs$.

Poço Largo (Angstroms)	$\langle V(x) \rangle$ - Tamm-State 1 (meV)			$\langle V(x) \rangle$ - Tamm-State 2 (meV)			$\langle V(x) \rangle$ - Tamm-State 3 (meV)		
	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados
80	-321.26	-1815.90	-1809.75	-290.15	-1839.66	-1845.69	-	-1991.49	-1829.46
120	-326.91	-1810.89	-1808.60	-310.81	-1829.69	-1810.52	-284.16	-1846.94	-1814.22
160	-328.57	-1809.36	-1808.27	-323.47	-1814.53	-1809.11	-310.79	-1825.48	-1810.78
200	-329.22	-1808.75	-1808.13	-326.62	-1811.31	-1808.35	-318.51	-1819.75	-1804.69

Tabela F.6 - Valores Esperados da Posição dos Estados de Tamm para os elétrons da Banda de Condução e Buracos Leves e Pesados da Banda de Valência a $T = 0K$, quando variamos o poço mais largo em 2, 3, 4 e até 5 vezes o tamanho de um poço comum de 40 angstroms de comprimento, que forma a Super-Rede de $Al_{0.20}Ga_{0.80}As/GaAs$.

Poço Largo (Angstroms)	$\langle X \rangle$ - Tamm-State 1 (Angstroms)			$\langle X \rangle$ - Tamm-State 2 (Angstroms)			$\langle X \rangle$ - Tamm-State 3 (Angstroms)		
	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados
80	640.18	640.24	642.16	680.26	680.53	646.86	-	721.24	668.64
120	660.01	660.09	659.95	670.26	666.64	659.98	716.43	693.40	673.11
160	679.87	680.01	679.78	680.94	682.52	679.84	706.62	685.44	679.91
200	699.86	700.30	699.64	700.26	701.45	699.83	710.25	703.30	700.18

Tabela F.7 - Desvio Padrão da Posição dos Estados de Tamm para os elétrons da Banda de Condução e Buracos Leves e Pesados da Banda de Valência a $T = 0K$, quando variamos o poço mais largo em 2, 3, 4 e até 5 vezes o tamanho de um poço comum de 40 angstroms de comprimento, que forma a Super-Rede de $Al_{0.20}Ga_{0.80}As/GaAs$.

Poço Largo (Angstroms)	σ - Tamm-State 1 (Angstroms)			σ - Tamm-State 2 (Angstroms)			σ - Tamm-State 3 (Angstroms)		
	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados	Elétrons	Buracos Leves	Buracos Pesados
80	19.45	21.29	17.49	47.76	52.74	26.16	-	58.68	28.93
120	26.19	27.28	24.64	49.52	61.34	36.84	106.60	69.22	38.55
160	33.26	34.22	31.83	52.73	77.87	46.87	113.96	85.63	50.05
200	40.41	41.32	37.91	72.30	109.17	53.18	120.54	114.71	54.76

Tabela F.8 - Energia do Estado de Tamm para os elétrons da Banda de Condução e Buracos Leves e Pesados da Banda de Valência, quando variamos a localização do poço mais largo.

Poço mais Largo	Energia - Elétrons (meV)	Energia - Buracos Leves (meV)	Energia - Buracos Pesados (meV)
ÚLTIMO	-254.94	-1846.64	-1820.57
PENÚLTIMO	-256.92	-1846.92	-1820.20
ANTE-PENÚLTIMO	-258.95	-1844.73	-1819.33
MEIO	-259.90	-1842.28	-1819.05

Tabela F.9 - Desvio Padrão do Estado de Tamm para os elétrons da Banda de Condução e Buracos Leves e Pesados da Banda de Valência a $T = 0K$, quando variamos a localização do poço mais largo (60 angstroms).

Poço mais Largo	σ - Elétrons (Angstroms)	σ - Buracos Leves (Angstroms)	σ - Buracos Pesados (Angstroms)
ÚLTIMO	28.49	44.58	15.37
PENÚLTIMO	29.95	39.34	16.72
ANTE-PENÚLTIMO	31.80	41.43	16.75
MEIO	39.90	47.02	16.91

• CAPÍTULO 4: EFEITO STARK EM SUPER-REDES

Tabela F.10 - Valores Numéricos das Auto-Energias para as Mini-Bandas de Portadores quando $E = 0, 30, 60$ e 90 kV/cm ($T=0$ Kelvin) O referencial da energia se situa no topo da Banda de Condução. A Altura das barreiras são de -330 meV para a Banda de Condução e -192 meV para a de Valência. O gap de energia entre estas bandas é de 1478 meV.

a) Elétrons da Banda de Condução

Auto-Estados	$E = 0$ kV/cm	$E = 30$ kV/cm	$E = 60$ kV/cm	$E = 90$ kV/cm
en_1 (meV)	-237.18	-322.24	-420.43	-521.91
en_2 (meV)	-229.75	-294.65	-376.94	-463.88
en_3 (meV)	-217.58	-272.34	-340.78	-412.94
en_4 (meV)	-201.10	-252.54	-307.04	-363.36
en_5 (meV)	-181.20	-232.50	-273.80	-332.53
en_6 (meV)	-159.76	-208.45	-238.78	-327.50
en_7 (meV)	-141.08	-174.79	-216.80	-314.35

b) Buracos Leves da Banda de Valência

Auto-Estados	$E = 0$ kV/cm	$E = 30$ kV/cm	$E = 60$ kV/cm	$E = 90$ kV/cm
en_1 (meV)	-1851.73	-1883.30	-1894.64	-1903.17
en_2 (meV)	-1857.47	-1925.46	-1935.35	-1958.18
en_3 (meV)	-1866.91	-1932.59	-1970.19	-2000.66
en_4 (meV)	-1879.84	-1948.71	-2000.85	-2002.60
en_5 (meV)	-1895.76	-1964.16	-2002.98	-2005.65
en_6 (meV)	-1930.42	-1985.59	-2004.56	-2007.86
en_7 (meV)	-1913.59	-2001.94	-2013.58	-2010.92

c) Buracos Pesados da Banda de Valência

Auto-Estados	$E = 0$ kV/cm	$E = 30$ kV/cm	$E = 60$ kV/cm	$E = 90$ kV/cm
en_1 (meV)	-1831.08	-1850.70	-1855.97	-1861.82
en_2 (meV)	-1832.10	-1862.31	-1888.82	-1910.83
en_3 (meV)	-1833.69	-1878.29	-1921.80	-1958.41
en_4 (meV)	-1835.70	-1902.31	-1951.87	-1961.17
en_5 (meV)	-1837.87	-1912.79	-1954.84	-2002.48
en_6 (meV)	-1839.97	-1930.52	-1987.85	-2008.97
en_7 (meV)	-1841.28	-1946.99	-1990.33	-2011.22

Tabela F.11 - Valores Esperado da Posição $\langle X \rangle$ e seus respectivo Desvio Padrão para as Mini-Bandas Eletrônicas. Os buracos leves e pesados apresentam comportamentos semelhantes. O campo $E = 0, 30, 60$ e 90 kV/cm ($T=0$ Kelvin)

Auto-Estados	$E = 0$ kV/cm	$E = 30$ kV/cm	$E = 60$ kV/cm	$E = 90$ kV/cm
$\langle X \rangle_1$ (Angstroms)	875.00	1017.78	1034.6615	1041.7996
$\langle X \rangle_2$ (Angstroms)	875.00	958.26	985.2130	993.2892
$\langle X \rangle_3$ (Angstroms)	875.00	910.74	937.6166	942.1984
$\langle X \rangle_4$ (Angstroms)	875.00	872.73	886.1113	888.6653
$\langle X \rangle_5$ (Angstroms)	875.00	849.11	833.0944	846.0543
$\langle X \rangle_6$ (Angstroms)	875.00	823.50	787.1774	1251.0543
$\langle X \rangle_7$ (Angstroms)	875.00	770.32	1159.5809	1322.6184

Auto-Estados	$E = 0$ kV/cm	$E = 30$ kV/cm	$E = 60$ kV/cm	$E = 90$ kV/cm
σ_1 (Angstroms)	77.83	37.15	28.27	23.50
σ_2 (Angstroms)	114.56	64.84	47.13	37.33
σ_3 (Angstroms)	120.46	86.15	57.13	43.40
σ_4 (Angstroms)	122.75	100.30	62.20	46.36
σ_5 (Angstroms)	123.67	102.25	63.14	57.82
σ_6 (Angstroms)	121.42	87.76	59.50	92.66
σ_7 (Angstroms)	88.23	57.86	134.69	137.83

• CAPÍTULO 5: RESSONÂNCIA ENTRE AUTO-ESTADOS

Tabela F.12 - As frequências de oscilação variam conforme mudam os valores do campo elétrico. Abaixo está tabelado estas frequências do primeiro aos demais níveis para elétrons, buracos leves e pesados.

a) Elétrons da Banda de Condução

E (kV/cm)	τ_{12} (fs)	E (kV/cm)	τ_{23} (fs)	E (kV/cm)	τ_{34} (fs)	E (kV/cm)	τ_{45} (fs)	E (kV/cm)	τ_{56} (fs)	E (kV/cm)	τ_{67} (fs)
7	901.61	8	265.04	9	113.74	10	72.58	11	51.48	12	40.29
8	1013.80	9	270.22	10	129.29	11	78.69	12	54.70	13	41.82
9	868.35	10	249.76	12	123.29	12	75.62	13	53.86	14	39.45

b) Buracos Leves da Banda de Valência

E (kV/cm)	τ_{12} (fs)	E (kV/cm)	τ_{23} (fs)	E (kV/cm)	τ_{34} (fs)	E (kV/cm)	τ_{45} (fs)	E (kV/cm)	τ_{56} (fs)	E (kV/cm)	τ_{67} (fs)
8	1029.78	10	544.47	14	370.64	24	403.67	35	283.17	75	140.29
9	1153.03	11	837.89	15	534.32	25	414.78	37	283.95	80	184.74
10	459.17	12	777.92	16	446.61	29	373.67	43	256.54	85	139.45

c) Buracos Pesados da Banda de Valência

E (kV/cm)	τ_{12} (fs)	E (kV/cm)	τ_{23} (fs)	E (kV/cm)	τ_{34} (fs)	E (kV/cm)	τ_{45} (fs)	E (kV/cm)	τ_{56} (fs)	E (kV/cm)	τ_{67} (fs)
4	2667.77	7	3178.59	8	2504.49	11	2420.25	11	1128.76	26	2052.68
5	3515.44	8	3259.91	9	2800.42	12	2520.25	13	2509.45	27	2309.68
6	2918.00	9	2821.29	10	2791.27	13	2403.78	15	2423.54	29	1909.50

• CAPÍTULO 6: DINÂMICA DE PACOTES DE ONDAS NUMA SUPER-REDE

Tabela F.13 - Níveis de Energia do estado fundamental do buraco pesado e dos quatro primeiros estados eletrônicos em função do campo elétrico.

E(kV/cm)	EN ₁ (meV)	EN ₂ (meV)	EN ₃ (meV)	EN ₄ (meV)	EN ₅ (meV)	EN ₆ (meV)	EN ₇ (meV)	EN ₈ (meV)
0	-254.94	-236.01	-225.74	-209.87	-189.35	-165.84	-143.50	-1802.49
5	-257.07	-248.83	-236.90	-220.71	-200.10	-176.75	-154.44	-1803.61
10	-263.27	-259.19	-247.97	-231.29	-210.72	-187.67	-164.39	-1805.14
15	-278.22	-262.81	-258.50	-241.71	-221.27	-198.47	-173.40	-1819.37
25	-309.57	-285.27	-268.30	-261.07	-242.09	-219.04	-189.19	-1854.44
29	-322.41	-295.73	-275.07	-265.86	-250.15	-226.69	-194.86	-1869.85
35	-341.90	-311.92	-288.17	-271.75	-261.09	-237.47	-202.85	-1891.65
40	-358.31	-325.79	-300.04	-278.81	-267.78	-245.79	-209.10	-1909.84
45	-374.85	-339.95	-312.33	-287.99	-272.63	-253.42	-215.06	-1928.07

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] - M. D. Feit, J. A. Fleck Jr., A. Steiger, J. Comput. Phys., V. 47, n. 3, 412(1982).
- [2] - R. Kosloff, J. Phys. Chem., 92, 2087(1988).
- [3] - Marc Vanhimbeeck et Al., Phys. Rev. A, V. 36, n. 10, 4612(1987).
- [4] - M. H. Degani, Phys. Rev. B, 44, n. 11, 5580(1991).
- [5] - M. H. Degani, J. Appl. Phys, 70, n. 8, 4362(1991).
- [6] - M. H. Degani, J. Appl. Phys. Letters, 59, n. 1, 57(1991).
- [7] - Leroy L. Chang, Leo Esaki, Phys. Today, pag. 36, October (1992).
- [8] - Shao-hua Pan, Si-min Feng, Phys. Rev. B, V. 44, n. 11 , 5668(1991).
- [9] - V. Ig. Tamm, Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion, Vol. 1, 733(1932).
- [10] - F. Agulló-Rueda, E.E. Mendez, H. Ohno, J. M. Hong, Phys. Rev. B, V. 42, n. 2, 1470 (1990).
- [11] - H. Ohno, E.E. Mendez, J.A. Brum, J.M. Hong, F. Agullo-Rueda, L.L Chang e L. Esaki, Phys. Review Letters, Vol. 24, n. 21, 2426(1990).
- [12] - Gregory H. Wannier, Phys. Rev., V. 117, n. 2, 432 (1960).
- [13] - G. Bastard et. al., Phys. Rev. B, V. 28, n. 6, 3241(1983).
- [14] - L. A. Cury, Ressonâncias Stark e Tunelamento em Heteroestruturas Semicondutoras, Dissertação de Mestrado no IFSC, Cap 4, 37(1987).
- [15] - E. E. Mendez, F. Agúillo-Rueda, J. M. Hong, Phys. Rev. Lett., V. 60, 2426(1988).
- [16] - E. Bigan, M. Allovon, M. Carre, Appl. Phys. Lett., V. 57, n. 4, 327 (1990).
- [17] - J. Zak, Phys. Rev. Lett., V. 20, n. 26, 1477 (1968).
- [18] - G.H.Wannier, Phys. Rev., V. 181, n. 3, 1364 (1969).
- [19] - J. Zak , Phys. Rev., V. 181, n. 3, 1366 (1969).

- [20] - L. L. Chang, L. Esaki, R. Tsu, Appl. Phys. Lett. V. 24, 593(1974).
- [21] - J. Bleuse, G. Bastard, P. Voisin, Phys. Rev. Lett., V. 60, n. 3, 220 (1988).
- [22] - P. Voisin, J. Bleuse, C. Bouche, S. Gaillard, C. Alibert, A. Regreny, Phys. Rev. Lett., V. 61, 1639 (1988).
- [23] - Clare L. Foden, K. W. Stevens, J. Phys. Condens. Matter, V. 2, 5179 (1990).
- [24] - A. P. Jauho, M. Jonson, Superlattices and Microst., V. 6, n. 3, 303 (1989).
- [25] - A. Hernandez Cabrera, P. Aceituno, H. Cruz, Superlattices and Microst., V. 11, n. 4, 375 (1992).
- [26] - E. C. Valadares, Phys. Rev. B, V. 41, n. 2, 1282 (1990).
- [27] - H. Schneider, H. T. Grahn, K. v. Klitzing, K. Ploog, Phys. Rev. Lett. V. 65, 2720(1990).
- [28] - A. Hernandez Cabrera, P. Aceituno, H. Cruz, Superlattices and Microst., V. 17, n. 2, 231 (1995).
- [29] - Serge Luryi, J. Quantum Electronics, V. 27, n. 16, Janeiro (1991).
- [30] - Hartmut G. Roskos, Martin C. Nuss, Jagdeep Shah, Karl Leo, David A. B. Miller, A. Mark Fox, Stefan Schmitt-Rink, Klaus-Köhler, Phys. Rev. Lett., V. 68, nº 14 (1992).
- [31] - J.E. Manzoli, Dinâmica de pacotes de ondas em fios e poços quânticos duplos assimétricos e acoplados, Dissertação de Mestrado no IFSC, Cap 2, 11(1993).
- [32] - K. Leo, K. Köhler, Phys. Rev. B, v. 50, n. 19, 14389 (1994).
- [33] - Jasprint Singin, “Physics of Semiconductors and their heterostructures”, pág 480.
- [34] - A. Sibille, J. Palmier, Appl. Phys. Lett., V. 60, n. 4, 457 (1992).
- [35] - Emilio E. Mendez e G. Bastard, Phys. Today, 34, June 1993.
- [36] - K. Leo, Peter H. Bolivar, R. Schwedler, solid state communications, v. 84, n. 10, 943 (1992).
- [37] - Jon Rotvig, Antti-Pekka Jaunho, Henrik Smith, Phys. Rev. Lett., V. 74, n. 10, 1831(1995).

- [38] - Joseph E. Avron, Jonathan Nemirovsky, Phys. Rev. Lett., V. 68, n. 14, 2212(1992).
- [39] - P. Král, J. Másek, Acta, Physica Polonica A, V. 82, n. 4, 697(1992).
- [40] - S. Fukatsu, Solid. State Eletronics, V. 37, n. 4-6, 817(1994).
- [41] - J. Y. Bigot, M. A. Mysec, S. Weiss, R. G. Ulbrich, D. S. Chemla, Phys. Rev. Letters, V. 70, n. 21, 3307(1993).
- [42] - Hartmut G. Roskos, Martin C. Nuss, K. Leo, D. A. B. Miller, Phys. Rev. Letters, V. 68, n. 14, 2216(1992).
- [43] - L. Hrivnák - Appl. Phys. Lett. V. 24 , 56(1990).
- [44] - W. L. C. Lima, Estrutura eletrônica em sistemas de dopagem tipo Delta, Dissertação de Mestrado no IFSC, Cap. 2, 9(1992).
- [45] - M. A. R. Souza, Propriedades eletrônicas de um poço duplo assimétrico com dopagem delta, Dissertação de Mestrado no IFSC, Cap 3, 21(1994).
- [46] - J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics, Cap 5, 236(1985).
- [47] - H. Anton, Álgebra Linear, Cap 7, 296(1982).
- [48] - G. Bastard, Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures, Cap. 1, 4(1986).
- [49] - D. T. Haar - Problems in Quantum Mechanics, Cap 7, 186(1975).
- [50] - P. Tronc, C. Cabanel, Superlattices and Microstru., V. 9, n. 2, 231(1991).
- [51] - T. Meier, G. von Plessen, P. Thomas, S. W. Koch, Phys. Rev. Lett., V. 73, n. 6, 902(1994).
- [52] - H. T. Grahn, F. Agullo-Rueda, A. D'Intino, K. H. Schmidt, K. Ploog, Solid State Eletronics, V. 37, n. 4-6, 835(1994).
- [53] - R. Ferreira, P. Voisin, G. Bastard, Solid State Eletronics, V. 37, n. 4-6, 857(1994).
- [54] - B. Demidovitch, Problemas e Exercícios de Análise Matemática, Cap. 9, 366.
- [55] - C. Kittel, Introdução à Física do Estado Sólido, Cap 7, 185(1978).

- [56] - K. V. Shalimova, Física de los Semicondutores, Cap. 2, 51. S. Jasprit, Physics of Semiconductors and their Heterostructures, Cap 13, 481(1993).
- [57] - G. H. Wannier, "Elements of Solid State Theory". Cambridge University Press, Cambridge (1959).
- [58] - C. Zener, Proc. R. Soc. London A, V. 145, 523(1934).
- [59] - F. Constantinescu e E. Magyari, Problems in Quantum Mechanics, Cap 2, 27(1982).
- [60] - Ph. Roussignol, M. Gurioli, L. Carraresi, M. Colocci, A. Vinattieri, G. Neu, Superlattices and Microstr., V. 9, n. 2, 151(1991).
- [61] - I. Tanaka, M. Nakayama, H. Nishimura, K. Kawashima e K. Fujiwara, Solid-State Electronics, Vol 37, n. 4-6, 863(1994).
- [62] - R. M. Eisberg, Fundamentos da Física Moderna, Cap 7, 186(1979).
- [63] - Stephen Gasiorowicz, Física Quântica, Cap. 16, 246.
- [64] - M. Alouani, S. Gopalan, M. Garriga, N. E. Christensen, Phys. Rev. Lett., V. 61, n. 14, 1643(1988).
- [65] - M. Yanaguchi, M. Morifuji, H. Kubo, E. Gornik, Solid State Electronics, V. 37, n. 4-6, 839(1994).
- [66] - C.T. Cohen, B. Diu e F. Laloe, Quantum Mechanics - V. 1, Cap. 2, 170(1977).
- [67] - P. L. Devries, A First Course of Computational Physics, Cap 3, 99(1991).
- [68] - D. U. V. Rosenberg, Methods for the numerical solution of partial differential equations, Apêndice A, 113(1975).
- [69] - N. W. Ashcroft e N. D. Mermin, Solid State Physics, Cap 10,. 180(1976).
- [70] - C. Weisbuch, B. Vinter, Quantum Semiconductor Structures, Cap 2, 26(1991).
- [71] - Alan Holden, "Conductors and Semiconductors", Cap. 5, Bell Telephone Laboratories.
- [72] - David S. Saxon, Elementary Quantum Mechanics, Cap. 7, 175.
- [73] - Cohen and Taylor, Rev. Mod. Phys., V. 59, n.4, 1139, October 1987.

[74] - W. H. Press, B. P. Flamery, S. A. Tevkolsky, Numerical Recipes (fortran version), Cap. 2, 40(1989).