

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS  
CENTRO DE CIÊNCIAS EXATAS E TECNOLOGIA  
DEPARTAMENTO DE FÍSICA  
PROGRAMA DE POS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

Pedro Henrique Pereira

Geração de corrente *spin* polarizada em heteroestruturas  
dopadas com impurezas magnéticas

São Carlos

2015

Pedro Henrique Pereira

Geração de corrente *spin* polarizada em heteroestruturas  
dopadas com impurezas magnéticas

Dissertação realizada sob a orientação do Prof. Dr. Paulo Farinas, apresentada ao Departamento de Física da UFSCar em preenchimento parcial dos requisitos para a obtenção do grau de Mestre em Física.

São Carlos

2015



UNIVERSIDADE FEDERAL DE SÃO CARLOS

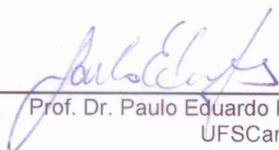
Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia  
Programa de Pós-Graduação em Física

---

**Folha de Aprovação**

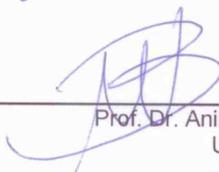
---

Assinaturas dos membros da comissão examinadora que avaliou e aprovou a Defesa de Dissertação de Mestrado do candidato Pedro Henrique Pereira, realizada em 07/08/2015:



---

Prof. Dr. Paulo Eduardo Fornasari Farinas  
UFSCar



---

Prof. Dr. Anibal Thiago Bezerra  
UNIFAL



---

Prof. Dr. Leonardo Kleber Castelano  
UFSCar

Dedico esse trabalho aos meus Pais  
e ao Demon (cachorro).

# Agradecimentos

Agradeço,

ao Prof. Paulo Farinas pelos dois anos de orientação e por ter aceito o desafio de orientar um aluno que “caiu de paraquedas” na sua sala à procura de um orientador. Nesse período sob sua orientação, eu aprendi bastante sobre física e sobre assuntos aleatórios que surgiam durante nossas reuniões.

aos colegas de trabalho mais próximos: Edson, Jhonni, Mariana, Isabela, Flávia, Poliana, Poliane, Jaldair, Leonardo (Zagaya), Leonilson e Vivaldo a convivência descontraída nas horas do café, nas partidas de *Counter Striker* e nas trocas de experiências.

ao Anibal por sua contribuição ímpar no desenvolvimento do mestrado desde a definição do projeto até na implementação numérica do problema.

aos Prof. Marcelo Maialle, Marcos Degani e Nelson Studart membros do grupo DISSE (HARAS) pelos ensinamentos e discussões à respeito do projeto.

aos amigos que fiz em São Carlos Dani, Cristian, Vitor e Luis pelos momentos de alegria e as festas que passei com eles.

aos amigos de Patos de Minas Ana, Andre, Arthur, Alan, Lays e Willian pela amizade desde o tempo da escola.

à CAPES pelo apoio financeiro concedido durante todo o período de mestrado.

a todos que de alguma forma contribuíram com o meu progresso como aluno e como Ser.

Adventure time  
C'mon grab your friends,  
We'll go to very distant lands  
With Jake the dog and Finn the human  
The fun will never end,  
It's ADVENTURE TIME!

*Adventure Time*

## Resumo

Nesta dissertação, foi realizada a modelagem computacional de duas estruturas semicondutoras compostas por dois poços quânticos, sendo um poço dopado com impureza magnética. Cada estrutura foi projetada para formar um sistema de três níveis eletrônicos, cujos os valores de energia favoreçam o espalhamento  $\Lambda$  quando fótons incidem na estrutura. Este tipo de espalhamento consiste na transição do elétron, inicialmente confinado em um nível de baixa energia, para um nível mais alto de energia, com a subsequente captura para um terceiro nível de energia menor que o segundo. Os três níveis situam-se em camadas confinantes diferentes que se sucedem ao longo do comprimento da estrutura, antes de uma região extensa de saída, na qual o elétron fica livre para contribuir com a fotocorrente. A terminologia faz referência ao “caminho” feito pelo elétron em um diagrama de energia versus posição. O elétron sobe para o nível mais alto intermediário e, em vez de ser ejetado na segunda transição, ele é recapturado antes de poder contribuir para geração de fotocorrente. O efeito é ressonante, para conseguí-lo, dois lasers, um de cada frequência fixa e outro variável são incluídos no modelo. A dopagem magnética no segundo poço quântico faz com seu potencial seja dependente do *spin* do elétron. Com isso, a frequência de aprisionamento é dependente do *spin* ou seja, o aprisionamento da componente do *spin* é seletiva na frequência do campo de aprisionamento. Para realizar os cálculos, a equação de Schrödinger dependente do tempo, para um elétron na aproximação de massa efetiva, foi resolvida numericamente, por meio da evolução temporal das funções de onda do sistema. As frequências ressonantes foram obtidas pelo cálculo do espectro de absorção e também foi verificado a condição de não ser permitido a transição óptica entre cada estado fundamental de cada poço. Foi feito o estudo da resposta espectral da fotocorrente no regime ressonante. Verificou-se o surgimento de uma atenuação da amplitude da fotocorrente com o aumento da intensidade do campo de aprisionamento, evidenciando o fenômeno do aprisionamento populacional coerente. A projeção da função de onda evoluída no tempo em cada autoestado do sistema de três níveis mostrou a formação do estado escuro. Este estado é uma combinação linear de cada estado fundamental e sua principal característica é bloquear a transição para o estado de maior energia, deixando o sistema inerte ao campo eletromagnético. Essa heteroestrutura proposta mostrou um grande grau de

seletividade do *spin*, sendo assim uma forte candidata para um dispositivo de geração de fotocorrente polarizada em *spin*.

Palavras-Chaves: Geração de corrente polarizada em *spin*; semiconductor magnético diluído; aprisionamento coerente de população; método *Split-Operator*; dispositivos semicondutores

## Abstract

In this dissertation, the computational modeling of two semiconductor structures composed of two quantum wells was performed, being a quantum well doped with magnetic impurities. Each structure was designed to form a three-level electronic system, whose energy values favor scattering  $\Lambda$  when photons affect the structure. This type of scattering consists of the transition of the electron, initially confined at a low energy level, to a higher energy level, with subsequent capture to a lower third energy level than the second. The three levels lie in different confining layers that follow each other along the length of the structure, before an extended region of exit, in which the electron is free to contribute to the photocurrent. The terminology refers to the "path" made by the electron in a diagram of energy versus position. The electron rises to the highest intermediate level, and instead of being ejected in the second transition, it is recaptured before it can contribute to photocurrent generation. The effect is resonant, to achieve it, two lasers, one of each fixed frequency and another variable are included in the model. The magnetic doping in the second quantum well makes its potential dependent on the spin of the electron. Thus, the trapping frequency is spin-dependent i.e. the trapping of the spin component is selective at the frequency of the trapping field. To perform the calculations, the time-dependent Schrödinger equation for the conduction band was solved numerically within the effective mass approximation using the split-operator method. The resonant frequencies were obtained by calculating of the absorption spectrum and also the condition of not allowing the optical transition between each fundamental state of each well was verified. The spectral response of the photocurrent was studied in the resonant regime. It was verified the appearance of an attenuation of the amplitude of the photocurrent with the increase of the intensity of the trapping field, evidencing the phenomenon of the coherent trapping population. The projection of the wave function evolved over time in each eigenstate of the three-level system showed the formation of the dark state. This state is a linear combination of each ground state and its main feature is to block the transition to the higher energy state, leaving the system inert to the electromagnetic field. This proposed heterostructure showed a high degree of spin selectivity, thus being a strong candidate for a spin polarized photocurrent generating device.

Keywords: Generation of spin polarized currents; diluid magnetic semiconductor; coherent trapping population; Split-Operator method's; semiconductors devices

# Sumário

<b>Introdução</b>	<b>1</b>
<b>1 Revisão teórica</b>	<b>5</b>
1.1 Elétrons em sólido cristalino . . . . .	5
1.2 Classificação dos sólidos . . . . .	7
1.3 Semicondutores . . . . .	7
1.3.1 Arseneto de Gálio ( <i>GaAs</i> ). . . . .	10
1.3.2 Alumínio Arseneto de Gálio <i>AlGaAs</i> . . . . .	10
1.3.3 Semicondutores magnéticos diluídos - Arseneto de Gálio dopado com Manganês ( <i>Ga,Mn</i> ) <i>As</i> . . . . .	11
1.4 Poço quântico . . . . .	12
1.5 Transparência eletromagneticamente induzida e Aprisionamento coe- rente de população . . . . .	16
1.6 Métodos numéricos para a solução da equação de Schrödinger . . . . .	17
1.6.1 O método do <i>Split operator</i> . . . . .	19
1.6.2 O método do <i>Fourier Grid Hamiltonian</i> . . . . .	19
1.7 Observáveis físicos . . . . .	21
1.7.1 Autoenergia . . . . .	21
1.7.2 Espectro de absorção . . . . .	22
1.7.3 Fotocorrente . . . . .	24
1.7.4 Ocupação . . . . .	24

<b>2</b>	<b>Resultados e discussões</b>	<b>26</b>
2.1	Poço quântico duplo desacoplado . . . . .	26
2.1.1	Detalhe da heteroestrutura . . . . .	26
2.1.2	Fotocorrente com o campo de excitação . . . . .	30
2.1.3	Fotocorrente com os campos de excitação e de aprisionamento	31
2.1.4	Ocupação com o campo de excitação . . . . .	36
2.1.5	Ocupação com os campos de excitação e de aprisionamento . .	38
2.2	Poço quântico duplo acoplado . . . . .	43
2.2.1	Detalhe da heteroestrutura . . . . .	43
2.2.2	Fotocorrente com o campo de excitação . . . . .	44
2.2.3	Fotocorrente com os campos de excitação e de aprisionamento	45
2.2.4	Ocupação com o campo de excitação . . . . .	49
2.2.5	Ocupação com os campos de excitação e de aprisionamento . .	50
	<b>Conclusão</b>	<b>57</b>
	<b>Apêndice A O método <i>Split Operator</i></b>	<b>64</b>
A.1	Evolução da função de onda no domínio real . . . . .	64
A.2	Evolução da função de onda no domínio imaginário . . . . .	69
	<b>Apêndice B O Método <i>Fourier Grid Hamiltonian</i> para autofunções e autoenergias para estados ligados</b>	<b>72</b>
B.1	O método . . . . .	72
B.2	Implementação numérica do método . . . . .	76
	<b>Apêndice C Observáveis físicos</b>	<b>78</b>
C.1	Autoenergia . . . . .	78
C.1.1	Valor esperado do hamiltoniano . . . . .	78
C.1.2	<i>Power spectrum</i> . . . . .	79
C.2	Espectro de absorção . . . . .	80
C.2.1	Regra de ouro de Fermi . . . . .	80

---

C.2.2 Método dinâmico . . . . .	83
C.3 Ocupação . . . . .	84
C.4 Fotocorrente . . . . .	84

# Introdução

A geração controlada de corrente elétrica polarizada em *spin* é um dos pilares da spintrônica [Žutić et al., 2004]. A corrente polarizada em *spin* tem grande potencial no desenvolvimento do computador quântico, pois os *qubit's*, unidades básicas da informação, podem ser gerados e manipulados com essas correntes polarizada em *spin*[Awschalom et al., 2013]. Atualmente, diversos dispositivos de estado sólido são estudados para o controle de *spin*. Em especial, heteroestruturas com semicondutores magnéticos diluídos (do inglês *Diluted Magnetic Semiconductors*(DMS)) [Gaj and Kossut, 2011] tem atraído atenção devido à possibilidade de unir o processamento de informação e armazenamento de dados em um único dispositivo por meio da corrente *spin* polarizada. Neste trabalho foi proposto duas heteroestruturas formadas por dois poços quânticos, um feito de uma liga semicondutora e o outro de um semicondutor magnético diluído, para a geração de fotocorrente polarizada em *spin* por meio de aprisionamento coerente de população de uma componente de *spin* e enquanto a outra componente é livre para gerar fotocorrente.

Assim, na spintrônica existe dois graus de liberdade, carga e *spin*, que podem ser usados ao mesmo tempo no dispositivo. Geralmente a carga elétrica para cálculos binários e o *spin* para o armazenamento de informação [Arpaci-Dusseau and Arpaci-Dusseau, 2015]. A spintrônica é uma área multidisciplinar cujo tema central é o estudo do controle e manipulação dos graus de liberdade do *spin* em um sistema de estado sólido. A geração e controle de portadores *spin* polarizados são os dois ingredientes básicos para os dispositivos spintrônica.

O *spin* tem papel vital no processo de armazenado de dados, pois ele é feito por

meio de gravações magnéticas em discos rígidos, fitas magnéticas, etc [Arpaci-Dusseau and Arpaci-Dusseau, 2015]. Em geral, a armazenagem nesses sistemas magnéticos usa o *spin* dos elétrons dessas materias, que precisa de regiões minimamente extensas para poderem constituir o estado coletivo magnético (ferromagnetismo, por exemplo). A leitura da informação é feita por algum processo em que a magnetização controla a corrente de transporte. Os elétrons de transportes, responsáveis pelo processamento da informação, não tem seus *spins* participando do processo. Portanto, no dispositivo spintrônico pode ocorrer a fusão dos dois processos, a armazenagem de informação e processamento de dados, ou seja, o dispositivo realizaria simultaneamente as duas funções.

Para utilizar a microeletrônica atual utilizada nos circuitos integrados é necessário introduzir nos semicondutores características magnéticas, por meio de dopagem de metais de transição como cobre (Cu), ferro (F), manganês (Mn), etc. Esses metais de transição fornecem momentos magnéticos intrínsecos permanentes nos semicondutores, dando origem aos semicondutores magnéticos diluídos (do inglês DMS) [Furdyna, 1988].

Os semicondutores magnéticos diluídos formam uma classe de semicondutores que combina propriedades ópticas e de transporte com as propriedades magnéticas dos metais de transição. A interação entre os elétrons e os íons magnéticos nos DMS's pode ser modelada por meio do hamiltoniano de interação de troca do tipo *sp-d* [Furdyna, 1988]. Neste modelo, ao aplicar na amostra um campo magnético externo ocorre a quebra de degenerescência de *spin*, gerando uma separação energética típica de alguns meV entre as bandas de *spin*. Essa separação é consideravelmente maior que à separação *Zeeman* tradicional em semicondutores na presença de campo magnéticos, esse fenômeno é conhecido como *efeito Zeeman Gigante*. Essa quebra da degenerescência é tratada no modelo como um potencial dependente do *spin* e as bandas de *spin* são consideradas independentes.

Alguns dispositivos para a geração de corrente *spin* polarizada utilizando os DMS foram propostos na literatura, tanto trabalhos teóricos [Chattopadhyay et al., 2014] [Bezerra et al., 2014] quanto trabalhos experimentais [Ohno et al., 1998] [Ganichev et al., 2009]. Olbrich *et. al.* [Ganichev et al., 2009] demonstram a geração de corrente

*spin* polarizada em poços quânticos de materiais semicondutores das famílias II-VI, III-V e híbridos de II-VI III-V dopados com DMS por meio de campo magnético aplicado e iluminado por radiação Terahertz. Bezerra *et. al.* [Bezerra et al., 2014] propuseram uma heteroestrutura do tipo III-V dopada com Mn que poderia ser utilizado como polarizador de *spin* por meio de uma variação intensidade do campo elétrico estático aplicado ao sistema.

Em heteroestruturas de baixa dimensionalidade por exemplo, poços quânticos, pontos quânticos etc, o elétron tem seu movimento confinado em níveis discretos de energias, comparado com os níveis discretos de energias em um sistema atômico [Davies, 1997]. Devido à esses níveis discretos, as heteroestruturas são bons “laboratórios” de fenômenos que acontecem em nível atômico, como por exemplo a interferência quântica [Ficek and Swain, 2005] em sistemas de três níveis.

A transparência eletromagneticamente induzida (do inglês *electromagnetically induced transparency* (EIT)) [Boller et al., 1991b] [Fleischhauer et al., 2005] e o aprisionamento coerente de população (do inglês *Coherent Population Trapping* CPT)[Agap'Ev and Gornyi], são fenômenos causados pela interferência quântica em sistemas de três níveis, assistido por dois feixes incidentes sobre a estrutura. EIT e CPT ocorrem quando um meio opaco torna-se transparente numa faixa estreita do espectro eletromagnético de um campo de prova, devido à presença de um segundo campo de controle. A EIT e o CPT são fenômenos similares, mas com diferença entre eles, o CPT acontece num arranjo específico do sistema de três níveis, a formação  $\Lambda$ . Esta formação é composta por três estados, dois estados com energias distintas, cuja a transição óptica entre eles é proibida, e o terceiro estado com energia superior. A CPT ocorre quando dois lasers são incididos no sistema, um laser na frequência de transição entre o estado de menor energia e o estado de maior energia e o segundo laser com a frequência de transição do terceiro estado e o segundo estado. Com isso, é criado o estado escuro, ou seja um estado composto pela combinação linear dos dois estados de menores energias. A transição óptica entre os dois estados de menor energia não é permitida. Este estado aprisiona o elétron, impedindo-o de ser excitado, tornando o sistema transparente. A EIT ocorre em mais de uma configuração de sistema de três níveis.

Esses fenômenos já foram observados em semicondutores, como por exemplo [Wang et al., 2014], [Guan et al., 2014], [Santori et al., 2006] e [Maialle and Degani, 2011]. Em especial, Maialle e Degani [Maialle and Degani, 2011] demonstram a possibilidade do aprisionamento coerente de elétrons em um sistema de dois poços quânticos desacoplados que representa um sistema realístico de três níveis na formação  $\Lambda$ .

Nesta dissertação, é proposta a geração de corrente *spin* polarizada por meio do aprisionamento coerente de população em heteroestruturas de dois poços quânticos compostas por AlGaAs/GaMnAs desenhada para que *spins* eletrônicos respondam seletivamente a um campo eletromagnético de um laser, através da interação de três estados na formação  $\Lambda$ .

A dissertação foi dividida em três capítulos e três apêndices. No Capítulo 2 é feita a revisão teórica necessária para a compreensão do trabalho. No capítulo 3 é apresentado os estudos realizados em duas heteroestruturas para a geração de fotocorrente *spin* polarizada. Para tornar a leitura mais direta, os detalhes técnicos dos métodos numéricos e dos observáveis físicos foram alocados nos apêndices. Apêndice 1 o método do *Split Operator*, apêndice 2 o método do *Fourier Grid Hamiltonian* para autofunções e autoenergias de estados ligados e por fim no apêndice 3 os observáveis físicos.

## Revisão teórica

Neste capítulo será feita uma revisão teórica dos conceitos físicos necessários para a compreensão dos mecanismos envolvidos na geração da fotocorrente *spin* polarizada. Partindo das propriedades físicas dos semicondutores e dos semicondutores magnéticos diluídos. Seguido pela formação de poços quânticos em heteroestruturas semicondutoras, no qual ocorre o confinamento do elétron em estados discretos de energias na direção de crescimento da amostra e a regra de seleção para as possíveis transições ópticas. Depois, o conceito da transparência eletromagneticamente induzida em heteroestruturas de poços quânticos. Finalmente, uma breve apresentação dos métodos numéricos para a solução da equação de Schrödinger utilizados nesta dissertação.

### 1.1 Elétrons em sólido cristalino

Um sólido cristalino é constituído por um grande número de átomos, íons, distribuídos simetricamente numa rede de *Bravais* cuja a distância entre os ion é conhecido como parâmetro de rede  $a$  [Ashcroft et al., 1998] Figura 1.1(a). A dinâmica dos elétrons num sólido cristalino em principio é um problema complexo de muitos corpos, pois o hamiltoniano completo do sistema considera todas as possíveis interações que os elétrons sofrem, por exemplo; interação elétron-íon, elétron-elétron, elétron-fônons e etc. Para facilitar a compreensão e descrição do problema, algumas aproximações são necessárias no tratamento do problema. Em primeira aproximação, os elétrons

são considerados independentes e movendo numa rede periódica com os íons fixos. As interações são representadas por um potencial efetivo  $U(\mathbf{r})$  [Ashcroft et al., 1998].

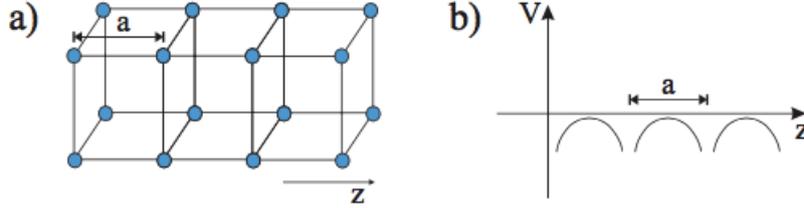


Figura 1.1: a) Estrutura cristalina de um sólido com parâmetro de rede  $a$  b) potencial periódico gerado pelos íons

Nesta aproximação, os elétrons independentes são conhecidos como elétrons de Bloch que satisfazem a equação de Schrödinger para um potencial efetivo e periódico figura 1.1(b),  $U(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r} + \mathbf{R})$  sendo  $\mathbf{R}$  o vetor de translação da rede primitiva,

$$\frac{\mathbf{p}^2}{2m}\psi_i(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) = E_i\psi_i(\mathbf{r}), \quad (1.1)$$

sendo  $\hat{\mathbf{p}}$  o operador *momentum* linear do elétron,  $m$  a massa do elétron e  $U(\mathbf{r})$  o potencial efetivo devido aos íons da rede e o potencial médio gerado pelos outros elétrons da estrutura. Os estados estacionários de Bloch podem ser escritos como o produto de uma função de onda plana com uma função com a periodicidade da rede de Bravais

$$\psi(\mathbf{r})_{n,\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})_{n,\mathbf{k}}, \quad (1.2)$$

os índices da função de onda são chamados de números quânticos,  $n$  é o índice da banda de energia e  $\mathbf{k}$  é o vetor de onda de Bloch. A equação de Schrödinger para os elétrons de Bloch se torna

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\nabla^2\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{k}}\mathbf{u}_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (1.3)$$

Uma característica devido ao potencial periódico gerado pela rede cristalina é o surgimento de bandas de energias contínuas e finitas. Essas bandas podem estar separadas por uma região de energia proibida, conhecido como *gap* de energia. A banda de menor energia é conhecida como a banda de valência e a banda após o *gap*

de energia recebe o nome de banda de condução. As principais características dos sólidos podem ser explicados por meio das bandas de energias, entre eles a classificação dos sólidos.

## 1.2 Classificação dos sólidos

Em  $T = 0$  K, os elétrons preenchem a banda de menor energia, a banda de valência, respeitando o princípio de exclusão de Pauli. Dependendo do número de elétrons, essa banda pode ser preenchida completamente ou parcialmente. O sólido em  $T = 0$  K pode ser classificado como condutor ou isolante, dependendo do preenchimento da banda de valência. Quando a banda é parcialmente preenchida, os elétrons têm a liberdade de movimentarem e com isso gerar corrente. Os materiais com essas propriedades são conhecidos como metais. Por outro lado, se a banda estiver completamente preenchida e a próxima banda for separada por um *gap* de energia, os materiais são conhecidos como isolante.

Para temperaturas acima de zero, o isolante pode conduzir corrente elétrica, caso o elétron receba energia, externamente, suficiente para superar o *gap* de energia para a próxima banda vazia, contribuindo assim para a condutividade do material. Os semicondutores são uma subclasse dos isolantes onde o *gap* entre as bandas é no máximo de 4 eV [Ashcroft et al., 1998]. Na Figura 1.2 tem a representação das bandas de energias para os sólidos, assim como o *gap* de energia entre as bandas para temperatura diferente de zero. Outra característica dos semicondutores é o aumento da condutividade elétrica em função do aumento da temperatura, pois a excitação térmica promove transições dos elétrons da banda de valência para a banda de condução.

## 1.3 Semicondutores

Os materiais semicondutores foram responsáveis pelos maiores avanços tecnológicos ocorridos no século 20, em especial nos dispositivos eletrônicos e optoeletrônicos. Como ocorreu na revolução da microeletrônica com a invenção do transistor em 1947.

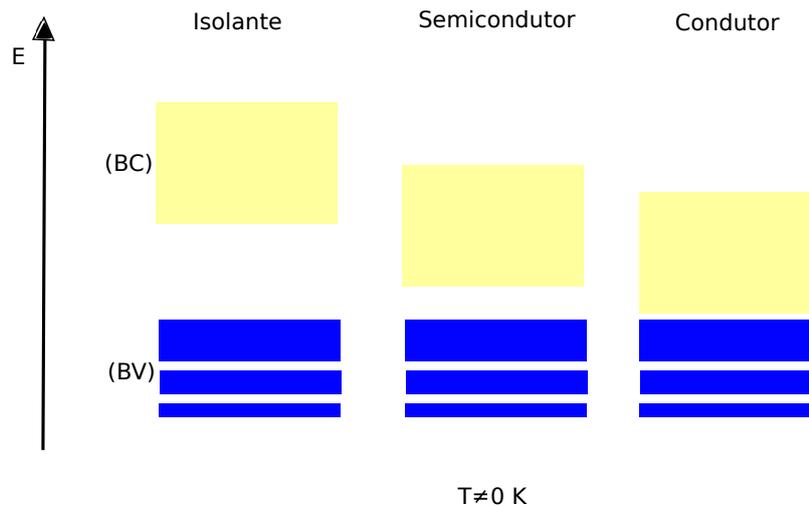


Figura 1.2: Representação das bandas de valência (BV azul) e condução (BC amarelo) e o gap de energia dos sólidos

O primeiro transistor foi feito de germânio mas hoje ele foi substituído pelo silício, ambos os elementos fazem parte da família IV da tabela periódica, sendo o silício mais abundante na natureza que o germânio. Outra aplicação dos semicondutores é nos dispositivos optoeletrônicos, como o laser de diodo feito de  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  usado nos leitores de mídia óptica. Nestes dispositivos o silício não é utilizado devido principalmente a sua baixa eficiência nas transições ópticas, neste caso as ligas binárias semicondutoras formada pelos elementos da família III-V e II-VI são mais usadas nestes dispositivos devido sua alta eficiente transições ópticas.

O motivo do silício apresentar baixa eficiência nas transições ópticas e o  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  uma alta eficiência está relacionado com o posicionamento entre o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução. Quando esse posicionamento se encontra no mesmo número de onda  $\vec{k}$ , o semicondutor é dito de *gap* direto pois o elétron da banda de valência pode ser excitado para a banda de condução ao absorver um fóton com energia maior que o *gap* de energia. Quando esse posicionamento não ocorre no mesmo número de onda, o material é dito de *gap* indireto, pois para ocorrer a transição é necessário a presença de um fónon além do fóton. Na Figura 1.3 há a estrutura de banda para o Si e GaAs onde fica evidente a diferença entre o *gap* direto e o *gap* indireto.

Nesta dissertação será focada nas ligas semicondutores formadas por elementos das famílias III-V: A liga binária de Arseneto de Gálio (GaAs), a liga ternária Alumínio

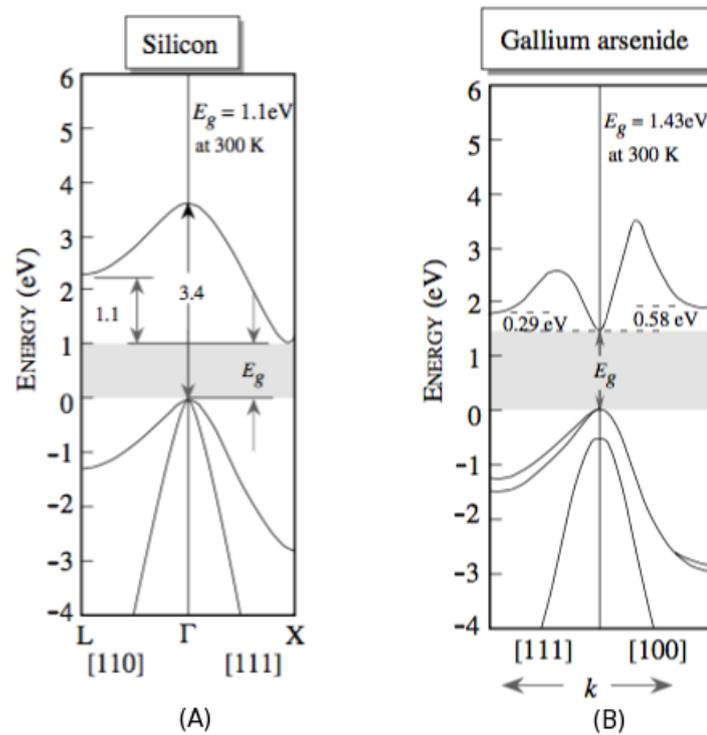


Figura 1.3: (A) Estrutura de banda do Silício, onde o o máximo da banda de valência não ocorre no mesmo número de onda  $k$  que o mínimo da banda de condução, caracterizando o Silício como material de *gap* indireto (B) Estrutura de banda do Arseneto de Gálio, onde o máximo da banda de valência ocorre no mesmo número de onda que o mínimo da banda de condução, caracterizando-o como material de *gap* direto [Singh, 2007].

Arseneto de Gálio ( $Al, Ga$ )As e no Arseneto de Gálio dopado com o metal de transição manganês (Ga,Mn)As.

### 1.3.1 Arseneto de Gálio ( $GaAs$ ).

O Arseneto de Gálio (GaAs), é um semiconductor da família III-V. Sua estrutura cristalina é do tipo Blenda de Zinco, figura 1.4(a), e com o parâmetro de rede de 5.6532 Å. No ponto de alta simetria  $\Gamma$  a liga apresenta *gap* direto de energia [Ashcroft et al., 1998] figura 1.4 (b). O valor do *gap* varia pouco com a temperatura, sendo de 1,5194 eV em  $T = 2$  K e à temperatura ambiente o *gap* é de 1,42 eV [Singh, 2007].

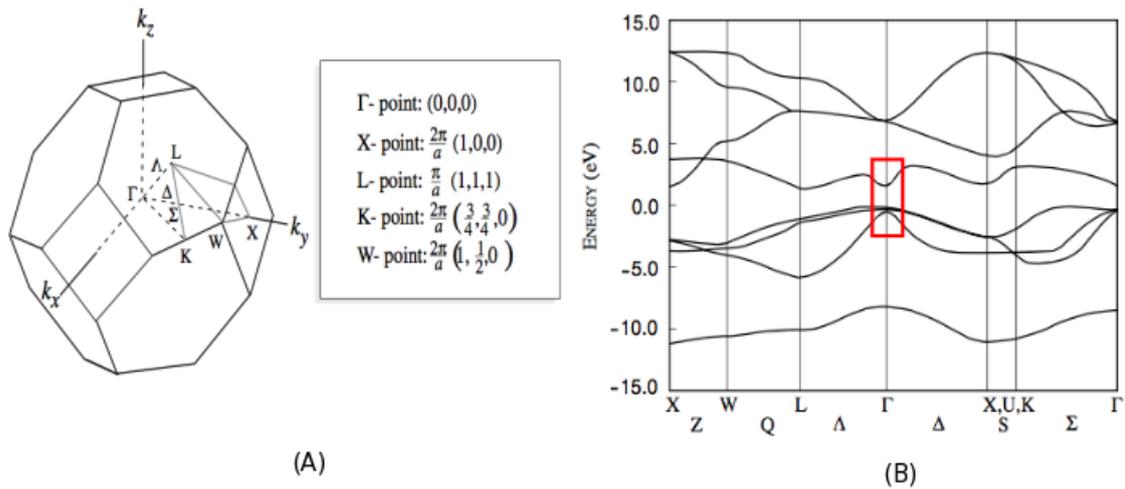


Figura 1.4: (a) Estrutura Cristalina tipo Blenda de Zinco com seus respectivos pontos de simetrias X, L, K e  $\Gamma$ . (b) Estrutura de banda de *bulk* do GaAs. A região dentro do quadro vermelho mostra o ponto de maior simetria  $\Gamma$  onde o *gap* entre as bandas é direto [Singh, 2007].

### 1.3.2 Alumínio Arseneto de Gálio $AlGaAs$

O Alumínio Arseneto de Gálio,  $Al_xGa_{1-x}As$ , tem o parâmetro de rede 5.6533 Å, valor bem próximo do GaAs. Essa semelhança entre os parâmetros permite o crescimento de heteroestrutura de  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$  com poucos efeitos de *stress* e *strain* na rede cristalina, possibilitando uma amostra de alta qualidade cristalina. O seu *gap* de energia é modificado a partir da concentração de alumínio na liga. O valor

do *gap* varia entre 1.42 eV (GaAs) à 2.16 eV (AlAs), para concentração abaixo de 40% o *gap* é direto. A energia de *gap* em relação à concentração de alumínio,  $x$ , pode ser estimada através da formula empírica [Lee et al., 1980]:

$$V(x) = 0.6(1155x + 370x^2)meV. \quad (1.4)$$

### 1.3.3 Semicondutores magnéticos diluídos - Arseneto de Gálio dopado com Manganês ( $Ga,Mn$ )As

A adição de uma pequena concentração de manganês, um metal de transição, de modo substancial na matriz GaAs fornece à liga uma propriedade adicional, além das propriedades de semicondutor, a propriedade ferromagnética. Essa liga faz parte de uma classe de materiais conhecidos como **semicondutores magnéticos diluídos** (*do inglês* DMS). Geralmente, essas ligas são formadas por semicondutores da família III-V e II-VI dopados com uma pequena concentração de metais de transição: Manganês (Mn), Cobalto (Co), Ferro (F) entre outros. A observação experimental dos DMS's ocorreram no final da década de 1980 e início da década 1990 [Story et al., 1986] [Ohno et al., 1992].

No início os DMS's da família II-VI tiveram maior atenção da comunidade científica devido à possibilidade de crescer amostra com alta concentração de metais de transição, na faixa de  $\sim 35\%$ , comparado com a concentração típica nos DMS's da família III-V, em torno  $\sim 8\%$ . Em contrapartida a temperatura de Curie típica das ligas II-VI é na região criogênia implicando em poucas aplicações tecnológicas [Sato et al., 2010]. Por outro lado, as ligas de III-V apresentam propriedades magnéticas em altas temperaturas, em alguns casos em temperatura ambiente. O grande desafio se encontra na adição de manganês de forma substancial. No início, a porcentagem era bem baixa e o manganês incorporava de forma intersticial, destruindo assim as propriedades magnéticas Dietl [2010]. Com o avanço das técnicas experimentais tem sido possível aumentar essa porcentagem de dopantes na forma substancial.

Os DMS's têm grande aplicabilidade na spintrônica. Espera-se que os dispositivos spintrônicos baseados em DMS's promovam uma integração entre comunicação, memória e processamento em um único dispositivo proporcionando um tempo menor

de processamento e um custo energético abaixo do patamar dos dispositivos atuais.

O surgimento do magnetismo nos DMS's está relacionado com o forte acoplamento entre os elétrons do semicondutor e os íons de Mn via interação do tipo sp-d Furdyna [1988]. Na presença de um campo magnético externo, ocorre a quebra de degenerescência de *spin*. Esse efeito pode ser modelado como um potencial dependente de *spin*, onde as componentes de *spin* são tratados independentes. Este efeito é conhecido como efeito *Zeeman* Gigante, a ordem de grandeza desse efeito é muito maior que o efeito *Zeeman* normal. O potencial dependente do *spin* é escrito como [Furdyna, 1988] [Michel et al., 2007]

$$V(\sigma_z) = \frac{5}{3} N_0 \beta \sigma_z x_{eff} J B_j \left( \frac{2\mu_B B}{k_B(T + T_0)} \right), \quad (1.5)$$

no qual  $N_0\beta$  é a constante de troca no valor de -0.27 eV,  $\sigma_z$  corresponde ao *spin* do elétron,  $x_{eff}$  a porcentagem efetiva da concentração de íons de manganês,  $J$  o *spin* do íon de Mn que é  $\frac{5}{2}$ ,  $B_j$  é a função de Brillouin de ordem  $j$ ,  $\mu_B$  é o magneto de Bohr,  $B$  o campo magnético externo aplicado,  $k_B$  a constante de Boltzmann,  $T$  a temperatura da amostra e  $T_0$  a interação antiferromagnética que é 12,5 K [Michel et al., 2007][Ganichev et al., 2009].

## 1.4 Poço quântico

Devido aos avanços nas técnicas de crescimento de semicondutores, tais como MBE (*molecular beam epitaxy*) e MOCVD (*Metal-Organic Chemical Vapor Deposition*), é possível crescer amostras semicondutoras com alto grau de pureza e a possibilidade de mudar abruptamente a composição química. A junção de dois semicondutores recebe o nome de heterojunção [Davies, 1997]. Geralmente na heterojunção, ocorre a formação de um degrau de potencial devido a diferença entre os *gap's* de energia de cada semicondutor.

Uma heteroestrutura do tipo poço quântico é formada por dois semicondutores, por exemplo A e B, na formação ABA sendo o *gap* de energia do semicondutor B menor que do semicondutor A. Se a largura do poço for da ordem do comprimento de onda de De Broglie do elétron, surgem efeitos quânticos adicionais levando ao

confinamento dos elétrons na direção de crescimento da heteroestrutura, conforme é visto na figura 1.5. Por outro lado, no plano paralelo ao crescimento os elétrons estão livre para se movimentarem. Em 1974 foram observados os estados confinados dos elétrons em um poço quântico através da medida do espectro de absorção [Dingle et al., 1974].

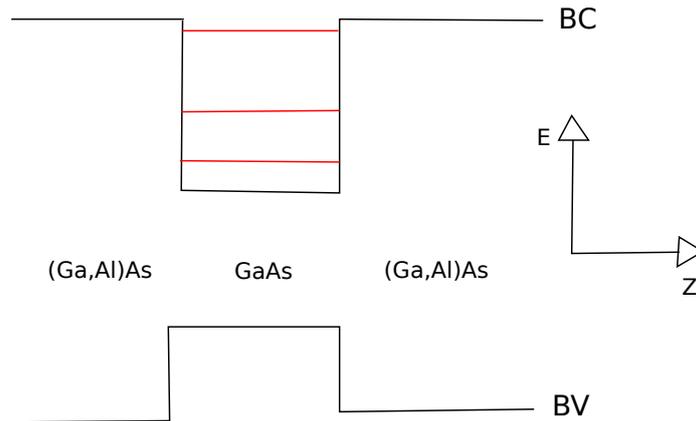


Figura 1.5: Perfil de potencial das bandas de condução e valência da heteroestrutura formada por  $\text{AlGaAs}/\text{GaAs}$  na direção de crescimento  $z$ . O *gap* de energia do  $\text{GaAs}$  é menor que do  $\text{AlGaAs}$ , dando origem ao poço quântico. Dentro do poço, os elétrons são confinados em níveis discretos de energia.

Na prática, as energias dos *gap's* disponíveis naturalmente não estão otimizados para aplicações tecnológicas. Com esse objetivo, surgiu a engenharia de estrutura de banda [Davies, 1997], onde uma variedade de estruturas artificiais são utilizadas para fornecer a estrutura de banda otimizada para uma aplicação particular. A engenharia de banda mais simples consiste em fazer ligas ternárias tais como  $(\text{Ga, Al})\text{As}$  e  $(\text{Hg, Cd})\text{Te}$  com o objetivo de obter a energia do *gap* desejado. Por exemplo, a profundidade do poço quântico formado pela heteroestrutura  $\text{Ga}_{1-x}\text{AsAl}_x/\text{GaAs}/\text{Ga}_{1-x}\text{AsAl}_x$  é ajustada através da concentração de alumínio.

No poço quântico, os elétrons na direção de crescimento estão confinados em níveis discretos de energia. Determinar os autoestados (autoenergias e autofunções) dos elétrons numa heteroestrutura é uma tarefa bastante complexa, se for considerada todas as interações, sendo necessário o uso de aproximações. Uma aproximação simples, mas eficiente, é a função envelope com a massa efetiva [Bastard, 1990]. Nesta aproximação, a função de onda do elétron é o produto entre a parte periódica da função Bloch com uma função envelope

$$\psi_i(\vec{r}) = u_n(\vec{r}) \cdot f_i(\vec{r}), \quad (1.6)$$

sendo  $u_n(\vec{r})$  a função periódica da banda  $n$  com a periodicidade da rede cristalina e  $f_i(\vec{r})$  a função envelope da subbanda  $i$  que varia lentamente no período da rede. Se a constante de rede de cada semiconductor da heteroestrutura for igual, pode-se considerar que a função de Bloch é igual em toda heteroestrutura. Com isso a equação de Schrödinger para a heteroestrutura se torna,

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 f_i(\vec{r}) + U(\vec{r}) f_i(\vec{r}) = E_i f_i(\vec{r}), \quad (1.7)$$

onde  $m^*$  a massa efectiva do elétron no semiconductor e  $U(\vec{r})$  o potencial criado pela diferença entre as energias de *gap* de cada semiconductor. Na aproximação de massa efetiva o efeito do potencial cristalino está embutido na massa efetiva do portador de carga, que varia de semiconductor para semiconductor. O confinamento do elétron acontece na direção de crescimento da amostra logo, a função envelope pode ser fatorada numa função na direção do crescimento, supondo que seja a direção  $z$ , e outra função referente ao plano perpendicular ao crescimento

$$f_{i,\perp}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}} \cdot \phi_i(z) \quad (1.8)$$

sendo  $A$  a área do estrutura e  $\vec{k}_\perp$  a componente do vetor de onda perpendicular ao plano de crescimento  $(k_x, k_y)$ . Finalmente, a equação de Schrödinger dentro das aproximações da função envelope e da massa efetiva é escrita como

$$\frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} \phi_i(z) + U(\vec{r}) \phi_i(z) = E_i \phi_i(z). \quad (1.9)$$

A autoenergia total será a soma da autoenergia perpendicular, que nada mais que a energia da partícula livre, e a autoenergia da direção de crescimento

$$E = E_i + \frac{\hbar^2 \vec{k}_\perp^2}{2m^*}, \quad (1.10)$$

sendo  $E_i$  as energias que depende do potencial  $U(z)$  e dos campos externos aplicados

à estrutura.

Por meio de excitação óptica, é possível excitar o elétron para os outros autoestados do poço. Esse tipo de transição, dentro da banda, é conhecido como transição intersubbanda. Se há simetria de inversão espacial na heteroestrutura é possível definir duas regras de seleção para essas transições [Liu and Capasso, 1999]. A primeira regra impõe que o campo eletromagnético incidente precisa ser polarizado na direção de crescimento da heteroestrutura e a segunda regra diz que apenas há transição entre subbandas quando a diferença entre elas seja um número ímpar,  $\Delta n = n_i - n_f = \text{ímpar}$ .

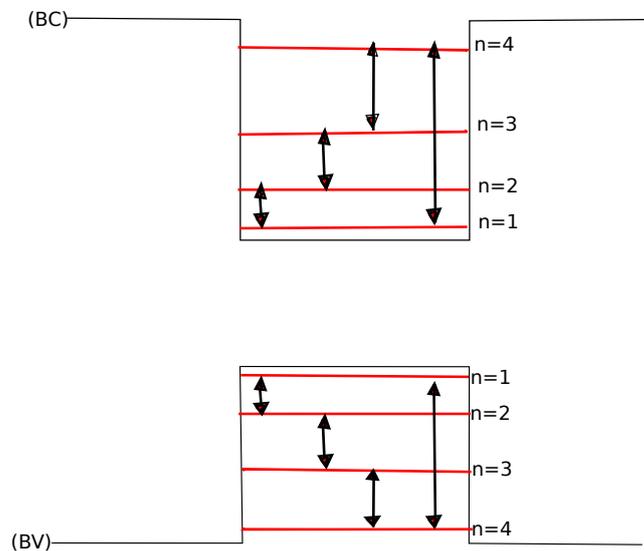


Figura 1.6: Regras de seleção para as transições intersubbanda, quando a heteroestrutura apresenta simetria de inversão espacial. As duas regras de seleção implicam que: o campo incidente precisa ser polarizado na direção de crescimento da amostra e que as transições acontecem quando a paridade entre as funções de onda mudam por exemplo, as possíveis transições do estado fundamental para os subníveis pares.

As transições intersubbandas correspondem a comprimentos de onda dentro do infravermelho, sendo essa região do espectro de grande interesse tecnológico para diversas aplicações tanto na área militar em sensores de imagem para mísseis e sistemas de vigilância, como na área civil como em dispositivos optoeletrônicos: fotodetectores de infravermelho [Levine et al., 1987]; e *quantum cascade laser* [Faist et al., 1994].

As transições intersubbandas são similares às transições que ocorrem em níveis atômicos. Logo é possível importar fenômenos que ocorrem tipicamente em escala atômica para as heteroestruturas com níveis discretos de energia. Como por exemplo,

efeitos de transparência eletromagneticamente induzida e o aprisionamento coerente populacional. Ambos os efeitos são decorrentes de interferência quântica.

## 1.5 Transparência eletromagneticamente induzida e Aprisionamento coerente de população

A interferência quântica que ocorre nas interações coerentes entre os campos eletromagnéticos e os sistemas de multiníveis atômico podem modificar completamente a resposta óptica do meio, como por exemplo os efeitos da transparência eletromagneticamente induzida (do inglês EIT) e o aprisionamento populacional coerente (do inglês CPT). Esses efeitos são observados como um decréscimo na absorção, ou na transmissão, ressonante pela criação de uma estreita janela transparente no meio opaco.

Historicamente, o CPT foi primeiramente observado nos trabalhos de Alzetta *et. al.*[Alzetta et al., 1976] e Gray[Gray et al., 1978] no final da década de 1980. Eles observaram o CPT como um decréscimo na emissão fluorescente de átomos de sódio em célula de vapor quando um segundo campo eletromagnético é adicionado ao sistema. Como é visto nas figuras 1.7 (a) e (b), a previsão teórica da emissão e o resultado experimental, respectivamente. A EIT foi observada por Harris *et. al.*[Boller et al., 1991a] no início da década de 1990, eles mostraram como um meio óptico opaco, de estrôncio, pode tornar-se transparente por meio de interferência quântica destrutiva causada pela aplicação de um segundo campo electromagnético. Na Figura 1.8 é mostrado a transmissão obtida pelos autores com e sem o campo adicional, evidenciando a mudança drástica na resposta óptica do meio quando se muda as frequências dos campos eletromagnéticos.

Ambos os efeitos são explicados através de sistemas de três níveis atômicos que interagem com dois campos eletromagnéticos altamente coerente (lasers). O sistema de três níveis é dividido em três configurações possíveis: o tipo lambda ( $\Lambda$ ), tipo ladder e o Tipo Vee (V), conforme é visto na figura 1.9. A EIT ocorre nas três possíveis configurações de sistema de três níveis e a CPT ocorre apenas na configuração tipo lambda.

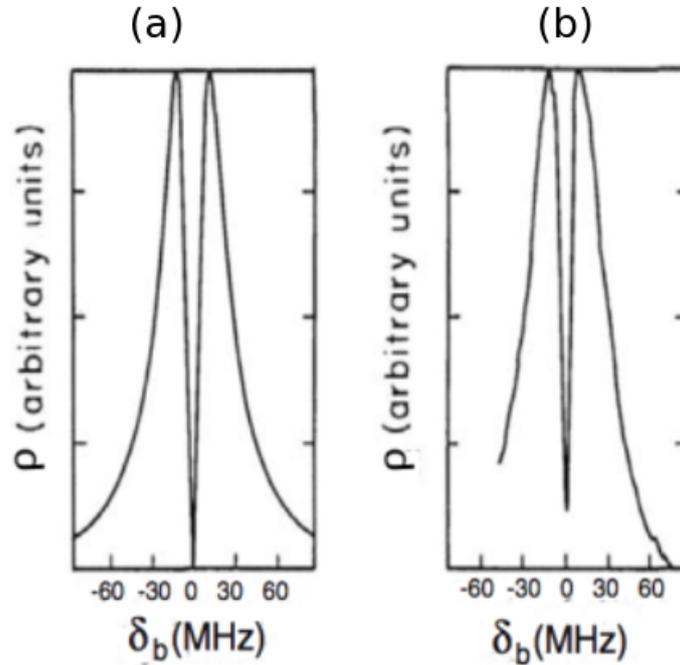


Figura 1.7: Figura extraída da referência [Gray et al., 1978]. (a) Previsão teórica da população do estado excitado (c) Observação experimental da população do estado excitado.

Em ambas as configurações, existem dois estados fundamentais,  $|\phi'_0\rangle$  e  $|\phi''_0\rangle$ , e um estado excitado  $|\phi_1\rangle$ . O estado excitado é conectado aos estados fundamentais através de dois campos com frequência  $\omega_e$  e  $\omega_a$ . A transição entre os estados fundamentais é proibida opticamente. O campo que faz a transição  $|\phi'_0\rangle \rightarrow |\phi_1\rangle$  é conhecido como o campo de prova (*probe laser*) e o campo que faz a transição  $|\phi''_0\rangle \rightarrow |\phi_1\rangle$  como o campo de controle (*control laser*).

A EIT e o CPT podem ser explicadas por meio da interferência quântica destrutiva que ocorre entre as amplitudes de probabilidade de cada transição quântica no sistema de três níveis. Em especial, na configuração  $\Lambda$  há a formação do estado escuro, uma combinação linear dos estados fundamentais, que nada mais é um estado onde a transição para o estado excitado não é mais permitida. Isso pode ser observado como uma transparência num meio opaco (transparência eletromagneticamente induzida) ou como um decaimento da ocupação do estado excitado (aprisionamento populacional coerente).

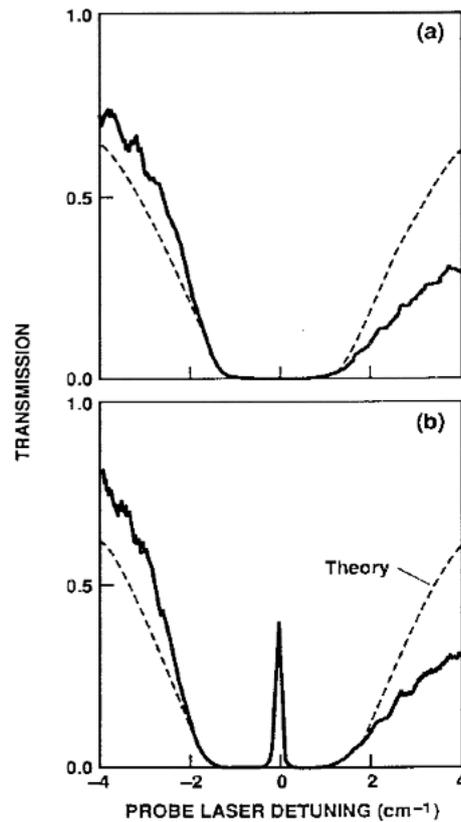


Figura 1.8: Primeira observação experimental da EIT em vapor de estrôncio por Boller et al. 1991. (a) Transmissão sem o segundo campo ressonante (b) transmissão com o segundo campo ressonante, a condição de ressonância ocorre quando  $\delta_b = 0$ .

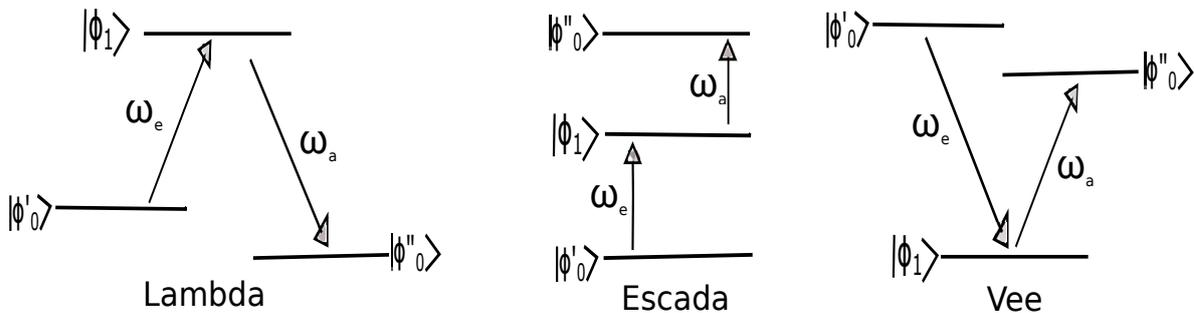


Figura 1.9: Sistema de três níveis nas configurações lambda ( $\Lambda$ ), escada e Vee (V).

## 1.6 Métodos numéricos para a solução da equação de Schrödinger

Para obter a fotocorrente polarizada em *spin* é necessário que uma componente do *spin* seja aprisionada no espalhamento  $\Lambda$  e a outra componente seja livre para gerar a fotocorrente polarizada em *spin*. Portanto, é preciso fazer o estudo das propriedades

ópticas da heteroestrutura para calibrar os campos externos na configuração  $\Lambda$ . As propriedades ópticas são obtidas a partir dos autoestados, autofunções e autoenergias, do sistema e da função de onda evoluída no tempo. Nas próximas seções, serão apresentados dois métodos numéricos para a solução da equação de Schrödinger, dependente e independente do tempo, *Split Operator* e *Fourier grid Hamiltonian*, e os observáveis físicos de interesse do problema.

### 1.6.1 O método do *Split operator*

O método do *Split Operator* possibilita o calculo numérico da evolução temporal de uma função de onda, através da quebra do operador evolução temporal em uma multiplicação de exponenciais [Degani and Maialle, 2010]. A evolução de uma função de onda no tempo  $t$  até o incremento de tempo  $\Delta t$  é dado por

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} \hat{H} dt} \psi(x, \Delta t), \quad (1.11)$$

sendo  $\hat{H}$  o hamiltoniano do sistema dado pela soma dos operadores de energia cinética e potencial. A equação 1.11 não pode ser resolvida exatamente, sendo necessário o uso de métodos aproximados para evoluir a função de onda. A aproximação do *Split Operator* consiste em escrever a exponencial da soma de dois operadores em um produto de exponenciais de cada operador, na forma de

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(\hat{x})\Delta t}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{P}^2 \Delta t}{2m}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(\hat{x})\Delta t}{2}} \psi(x, \Delta t) + O(\Delta t^3), \quad (1.12)$$

onde o erro associado nessa aproxima é na ordem de  $(\Delta t^3)$ . Esse erro é devido a não comutatividade entre os operadores do hamiltoniano.

Esse método também fornece as autoenergias e as autofunções da heteroestrutura quando é feito a evolução de uma função de onda arbitraria dentro do domínio de tempo imaginário  $t = i\tau$ .

O método do *split operator* tem a característica de resolver a equação de Schrödinger na presença de campos externos de modo exato sem a necessidade de utilizar a aproximação de pequenos campos. Para mais detalhes técnicos sobre o método consulte a apêndice A.

### 1.6.2 O método do *Fourier Grid Hamiltonian*

O método *Fourier Grid Hamiltonian* consiste na resolução da equação de Schrödinger independente do tempo, utilizando a ideia de escrever cada operador do hamiltoniano,  $\widehat{H}$ , na sua autobase: o operador energia cinética na representação dos *momenta* e o operador energia potencial na representação das posições [Marston and Balint-Kurti, 1989]. A equação de Schrödinger independente do tempo neste representação mista se torna

$$\int dx \left[ \langle x' | \widehat{H} | x \rangle - E_n \delta(x' - x) \right] \psi_n(x) = 0, \quad (1.13)$$

onde o elemento de matriz do hamiltoniano é

$$\langle x' | \widehat{H} | x \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik(x'-x)} T_k dk + V(x) \delta(x' - x) \quad (1.14)$$

$$T_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \quad (1.15)$$

sendo  $\psi_n(x)$  a autofunção na representação das posições,  $E_n$  a autoenergia,  $\delta(x' - x)$  a delta de Dirac,  $\hbar$  a constante reduzida de Planck,  $m$  a massa reduzida da heteroestrutura,  $k$  o vetor de onda e  $T_k$  o autovalor do operador *momentum* no espaço dos *momenta*.

A equação 1.13 é uma equação de autovalor cuja a solução é dada pela equação característica

$$\det \left[ \langle x' | \widehat{H} | x \rangle - E_n \delta(x' - x) \right] = 0. \quad (1.16)$$

Portanto, para cada autoenergia,  $E_n$ , existe um autovetor,  $\psi_n(x)$ , associado a ela que satisfaz essa condição.

A implementação numérica desse método requer a discretização dos espaços, *momenta* e posições, numa grade de  $N$  pontos com espaçamento uniforme entre os pontos de  $\Delta x$  cujo o tamanho total é  $N \cdot \Delta x$ . A forma discreta da equação 1.13 é

$$\sum_{i,j=1}^N \left[ \langle x_i | \hat{H} | x_j \rangle - E_n \delta_{ij} \right] \psi(x_i) = 0, \quad (1.17)$$

cujo os elementos discretos da matriz do hamiltoniano reduz a

$$\langle x_i | \hat{H} | x_j \rangle = H_{ij} = \frac{2}{N} \sum_{l=1}^n \sum_{i,j=1}^N \cos(l2\pi(i-j)/N) T_l + V(x_i) \delta_{ij}, \quad (1.18)$$

$$T_l = \frac{\hbar^2}{2m} (l\Delta k)^2 = \frac{2}{m} \left( \frac{\hbar\pi l}{N\Delta x} \right)^2, \quad (1.19)$$

em que  $N$  é o numero, impar, total de pontos na grade,  $n = (N - 1)/2$  a metade do tamanho da grade. A solução é dada pela equação característica

$$\det \left[ \hat{H}_{ij} - E_n \delta_{ij} \right] = 0. \quad (1.20)$$

Ou seja, o problema se reduz à diagonalização de uma matriz  $N \times N$ , obtendo um conjunto de  $N$  autoenergias e  $N$  autofunções. Neste método é necessário normalizar as autofunções. Para mais informações técnicas do metodo consulte o apêndice C.

## 1.7 Observáveis físicos

Em mecânica quântica, uma quantidade física mensurável é descrita por um operador. Os possíveis valores desta quantidade estão relacionados com os autovalores deste operador [Cohen-Tannoudji et al., 1998]. Nesta dissertação os observáveis de interesse serão: autoenergia; espectro de absorção; dotocorrente e nível de ocupação

### 1.7.1 Autoenergia

Em sistema conservativos, a forma mais direta de encontrar as autoenergias é através do valor esperado do hamiltoniano na base dos autoestados  $|\phi_n\rangle$

$$E_n = \langle \phi_n | \hat{H} | \phi_n \rangle. \quad (1.21)$$

Outra maneira de encontrar as autoenergias é por meio do cálculo do *power spec-*

trum [Degani et al., 2011],

$$P(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \psi(t) | \psi(0) \rangle, \quad (1.22)$$

sendo  $|\psi(0)\rangle$  um estado que é uma combinação linear todos os autoestados da estrutura,  $|\psi(0)\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle$ , e  $|\psi(t)\rangle$  sua evolução temporal. Substituindo  $|\psi(0)\rangle$  na equação 1.22, o *power spectrum* reduz a

$$P(\omega) \equiv \sum_n |a_n|^2 \delta(\omega - \epsilon_n/\hbar), \quad (1.23)$$

sendo o  $P(\omega)$  uma função com picos precisos nas autoenergias da estrutura. Se for possível fazer a integral 1.22 (acrescentando uma pequena continuação analítica a  $\omega$  para suavizar os picos), o resultado dará acesso às autoenergias. Portanto, as autoenergias podem ser obtidas sem a necessidade de conhecer as autofunções do hamiltoniano. Provendo uma alternativa direta para as autoenergias, em comparação com métodos tradicionais de diagonalização que requerem a representação do hamiltoniano em uma base finita (truncada) em que se exigem comumente muitos autoestados para conseguir precisão suficiente.

### 1.7.2 Espectro de absorção

A dinâmica do sistema de três níveis na configuração  $\Lambda$  é feita com dois campos incidentes, um de excitação do elétron no estado fundamental do poço quântico para um estado localizado no quasi-continuum e outro para o aprisionamento desse elétron no segundo poço quântico. A frequência de cada campo incidente precisa ser ajustada na frequência ressonante de cada transição. O espectro de absorção da estrutura fornece quais estados são opticamente acessíveis e qual é a energia necessária para a transição.

A lei áurea de Fermi fornece a probabilidade de transição do elétron no estado  $|\phi_i\rangle$  para o estado  $|\phi_f\rangle$  quando o sistema é perturbado, classicamente, por um campo eletromagnético, sendo ela expressa como

$$\alpha(E) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \phi_i | \hat{H}_{er} | \phi_f \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - E), \quad (1.24)$$

sendo  $\hat{H}_{er}$  o hamiltoniano da interação elétron-radiação dado por

$$\hat{H}_{er} = \frac{q}{m^*} \hat{A} \cdot \hat{p}, \quad (1.25)$$

onde  $\hat{A}$  é o potencial vetor da onda eletromagnética e  $\hat{p}$  o *momentum* do elétron. Dentro da aproximação de dipolo, no qual o comprimento de onda da onda incidente é muito maior que o comprimento de onda característico do sistema, o coeficiente de absorção numa transição intersubbanda é escrito como

$$\alpha(E) = \left[ \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_f - E_i) |\langle \phi_i | -e\hat{z} | \phi_f \rangle|^2 \right] \delta(E_f - E_i - E), \quad (1.26)$$

sendo  $-e\hat{z}$  o momento de dipolo elétrico. O termo entre colchetes é conhecido como força de oscilador, uma grandeza que mede quão forte é o acoplamento entre os autoestados por meio de um campo oscilante. A função delta de Dirac diz que a transição ocorre quando a energia da radiação incidente é igual a diferença de energia entre dois autoestados. Para calcular  $\alpha(E)$  usando a equação 1.26, é necessário conhecer os autoestados do sistema.

Uma segunda maneira de obter o espectro de absorção é utilizando o método dinâmico que não necessita conhecer todas as autoenergias e autofunções do hamiltoniano, apenas o estado inicial ocupado pelo elétron. Neste caso, a absorção é calculada a partir da transformada de Fourier da correlação do momento de dipolo elétrico médio entre o autoestado ocupado pelo elétron inicialmente e o estado completa do hamiltoniano

$$\alpha(E) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \phi_0 | e^{i\hat{H}t/\hbar} (-ez) | \psi(t) \rangle, \quad (1.27)$$

sendo  $\omega = E/\hbar$ ,  $|\phi_0\rangle$  o autoestado ocupado inicialmente pelo elétron e  $|\psi(t)\rangle$  o estado completo, composta de todos os autoestados do hamiltoniano. Substituindo  $|\psi(t)\rangle$ , expresso como combinação linear dos autoestados, na equação 1.27, obtendo

$$\alpha(E) \equiv \sum_n 2\pi a_n \langle \phi_0 | -ez | \phi_n \rangle \delta(\omega - (\epsilon_0 - \epsilon_n/\hbar)). \quad (1.28)$$

Nota-se que a função  $\alpha(E)$  tem picos precisos nas diferenças de energias entre o autoestado inicialmente ocupado e os demais autoestados do sistema. Logo, pode-se calcular a integral dada em 1.27 diretamente (adicionando uma pequena parte imaginária a  $\omega$  para suavizar os picos), e os picos presentes nesta função informam as diferenças de energia em relação ao autoestado à esquerda (bra) de 1.27 escolhido como inicialmente ocupado. Note que apenas este único autoestado é necessário no cálculo.

Portanto, como no caso do *power spectrum*, pode-se calcular  $\alpha(E)$  sem ter que recorrer a uma base de autoestados do sistema. Como o estado utilizado à direita (ket) em 1.27 é o estado completo do sistema, esses picos também informam possíveis regras de seleção, mas não processos virtuais, uma vez que apenas diferenças entre energias presentes no espectro aparecem no resultado (enquanto processos virtuais, de dois ou mais fótons, podem ter picos em energias que correspondem a múltiplos não inteiros dessas diferenças).

A fotocorrente, cuja a definição e o cálculo serão rapidamente explicados a seguir, tem informações completas sobre o espectro, mostrando inclusive, picos decorrentes de processos virtuais, quando estes ocorrem no sistema, além de ser uma quantidade que pode ser observada diretamente em experimentos.

### 1.7.3 Fotocorrente

A fotocorrente gerada pelas excitações ópticas é calculada através da densidade de corrente de probabilidade

$$J_c(\hbar\omega, t) = \text{Real} \left[ \frac{\hbar}{im} \psi^\dagger(z, t) \frac{d\psi(z, t)}{dz} \right] \Big|_{z=\pm z_c}, \quad (1.29)$$

onde  $z = \pm z_c$  são posições fora da região dos poços. A fotocorrente total do sistema é a soma das correntes geradas à direita e à esquerda

$$I(\hbar\omega) = \frac{e}{T} \int_0^T [J_{direita}(\hbar\omega, t) + J_{esquerda}(\hbar\omega, t)] dt, \quad (1.30)$$

sendo  $T$  é o tempo necessário para o elétron ser totalmente ionizado do autoestado.

#### 1.7.4 Ocupação

Além da fotocorrente gerada na configuração  $\Lambda$ , é interessante estudar dinamicamente a ocupação dos estados durante a evolução temporal. Considerando  $\phi_n^*(z)$  os autoestados do sistema de três níveis e  $\psi(z, t)$  o estado estado inicial elétron evoluído no tempo. A ocupação é definida como a projeção da função de onda evoluída no tempo nos autoestados do sistema, na forma de

$$\rho_{n1}(t) = \left| \int_0^T \phi_n^*(z) \psi(z, t) dz \right|^2, \quad (1.31)$$

sendo  $T$  o tempo total da evolução.

## Resultados e discussões

### 2.1 Poço quântico duplo desacoplado

#### 2.1.1 Detalhe da heteroestrutura

Neste trabalho foi proposto duas heteroestruturas semicondutoras, crescida em camadas de  $GaAs/Al_xGa_{1-x}As/Mn_xGa_{1-x}As$ . A primeira estrutura é formada por dois poços quânticos separados espacialmente entre si por uma larga barreira. O perfil de potencial da banda de condução gerado por essa configuração está representado na Figura 2.1. Ela é formada por dois poços quânticos: poço quântico 1 (1PQ) de 6 nm e poço quântico 2 (2PQ) de 4 nm, sendo este dopado com manganês Mn. Eles estão separados por uma barreira de potencial central (BC) de 30 nm. À esquerda do (1PQ) há uma barreira (BE) de 240 nm, à direita do (2PQ) uma fina barreira (BD) de 2 nm e um *continuum* de estados (CT) de 750 nm conectado ao sistema.

Devido ao tamanho de cada camada ser da ordem do comprimento de onda de De Broglie, a heteroestrutura exhibe efeitos quânticos de confinamento dos elétrons na direção de crescimento  $\hat{z}$  e no plano perpendicular ao crescimento os elétrons estão livres para se movimentarem. Esse plano é invariante por translação levando a conservação dos níveis de Landau durante o processo de geração de corrente pelo sistema. Devido à essa simetria, o problema pode ser reduzido aproximadamente ao problema unidimensional. O sistema foi tratado dentro da aproximação de massa efetiva para a banda de condução, o hamiltoniano unidimensional total deste sistema

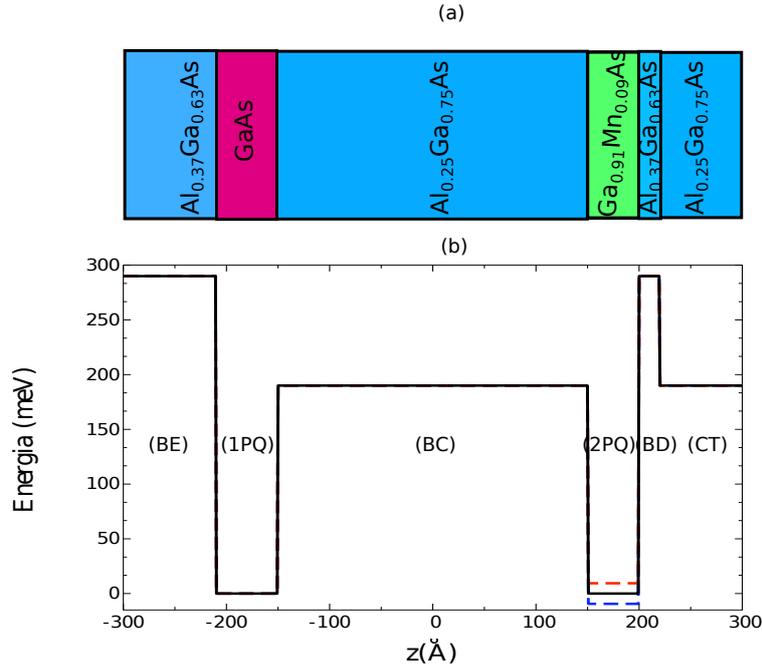


Figura 2.1: (a) Visão perpendicular ao crescimento da heteroestrutura proposta com a composição química de cada camada e seu tamanho. (b) Perfil da banda de condução na direção de crescimento, sendo as linhas tracejadas no segundo poço quântico (2PQ) referente às componentes do *spin*, vermelho para *spin up* e azul para *spin down*, quando é aplicado campo magnético externo na direção perpendicular às camadas.

é

$$H = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) + V(\sigma_z) - ezF_{ex}\sin(\omega_{ext}t) - ezF_{ap}\sin(\omega_{apt}), \quad (2.1)$$

sendo  $m^*$  a massa efetiva (constante em todo o sistema),  $F_{ex}$  e  $F_{ap}$  as amplitudes dos campos oscilantes (fazendo papel da luz incidente na amostra)<sup>1</sup>,  $V(z)$  o potencial gerado pelo descasamento das bandas de cada material da heteroestrutura e  $V(\sigma)$  o potencial efetivo dependente do *spin* do elétron devido as impurezas magnéticas, dado por

$$V(\sigma_z) = \frac{5}{3}N_0\beta\sigma_z x_{eff}JB_j \left( \frac{2\mu_B B}{k_B(T + T_0)} \right), \quad (2.2)$$

cujos os parâmetros foram listados na Eq.1.5. Neste sistema a concentração efetiva de Mn foi escolhida como 0.09%, a temperatura de  $T = 0$  K e o campo magnético de  $B = 10$  T. No modelo usado para justificar este potencial efetivo [Furdyna, 1988]

<sup>1</sup>foi considerada a aproximação de dipolo pois o comprimento de onda incidente é muito maior que a dimensão do sistema

às componentes do spin são tratadas independentes, portando não foi considerado qualquer efeito de acoplamento do *spin*.

Os autoestados desse sistema foram calculados pelo método do *Fourier Hamiltonian Grid* (apêndice B). Cada poço foi projetado para suportar apenas um autoestado e acima deles há um *continuum* de estados. A pequena barreira à direita (BD) modula esse *continuum* criando alguns estados de quase-ligados. Os autoestados e seu respectivo *power spectrum* estão representados na figura 2.2 (a) para o elétron de *spin down* (azul) e (b) para o elétron de *spin up* (vermelho). Os estados quase-ligados foram evidenciados dentre os estados no *continuum*. A camada de DMS modifica a profundidade do segundo poço, fazendo com que a autoenergia do estado fundamental do 2PQ seja diferente para cada componente do *spin*, essa pequena diferença energética, aproximadamente 20 meV, fornece a possibilidade do bloqueio seletivo de *spin* no aprisionamento coerente de população. O *power spectrum* de cada perfil de potencial está apresentado à direita de cada gráfico dos autoestados. O gráfico do *power spectrum* em função da energia apresenta uma sequência de picos precisos, cada pico significa que naquela energia há um autoestado. É importante ressaltar que mesmo sendo dois métodos distintos para o cálculo das autoenergias, eles fornecem resultados bem próximos.

Antes de calcular as propriedades de transporte eletrônico, tais como fotocorrente e ocupação, é necessário determinar quais estados são opticamente acessíveis e qual transição tem a maior probabilidade de acontecer. O espectro de absorção fornece a probabilidade do elétron no estado fundamental ser excitado para os demais autoestados, via excitação óptica. Conforme descrito na seção 1.7 sobre o espectro de absorção, essa quantidade pode ser encontrada por dois métodos distintos; via regra de ouro de Fermi e pelo método dinâmico.

Na Figura 2.3 é apresentado o espectro de absorção, considerando como estado inicial o estado fundamental do 1PQ, para *spin down* (azul) e *up* (vermelho) utilizando ambos os métodos; (a) método dinâmico e (b) regra de ouro de Fermi. Para o campo incidente com energia até 200 meV, há quatro picos distintos que são ópticamente acessíveis para ambos os *spin's*, sendo que a maior probabilidade de transição ocorre aproximadamente em 140 meV para ambos os casos, essa energia corresponde à

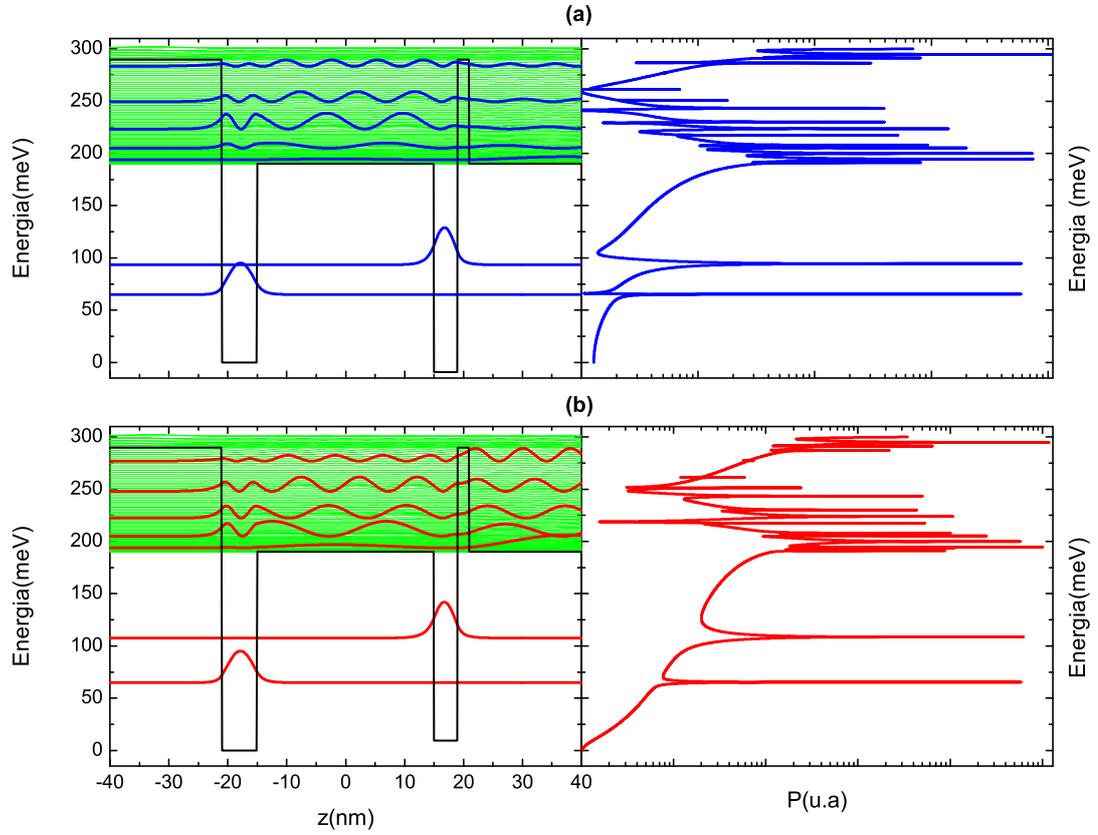


Figura 2.2: (a) Perfil de potencial da heteroestrutura 01 para o elétron de *spin down* e o seu respectivo *power spectrum*. Esse sistema permite dois estados ligados, um estado em cada poço quântico e acima deles há um *continuum* de estados. Devido a fina barreira à direita BD, surge estados quase-ligados que foram destacados entre os estados do *continuum*. Em cada pico no gráfico do *power spectrum* representa um autoestado com essa energia. Na figura (b) o mesmo gráfico para a componente *down* do *spin*.

transição entre o estado fundamental do 1PQ e o segundo estado quase-ligado no *continuum*. Aqui fica claro a função da BD na estrutura, ela cria regiões no *continuum* com uma alta probabilidade de transição. A transição entre os estados fundamentais de cada poço quântico não é permitida ópticamente devido à separação espacial entre eles, pois a probabilidade de transição é proporcional ao momento de dipolo,  $\langle \psi_m | z | \psi_n \rangle$ . Portanto, um único campo oscilante de excitação faz a transição para ambos os *spin's*.

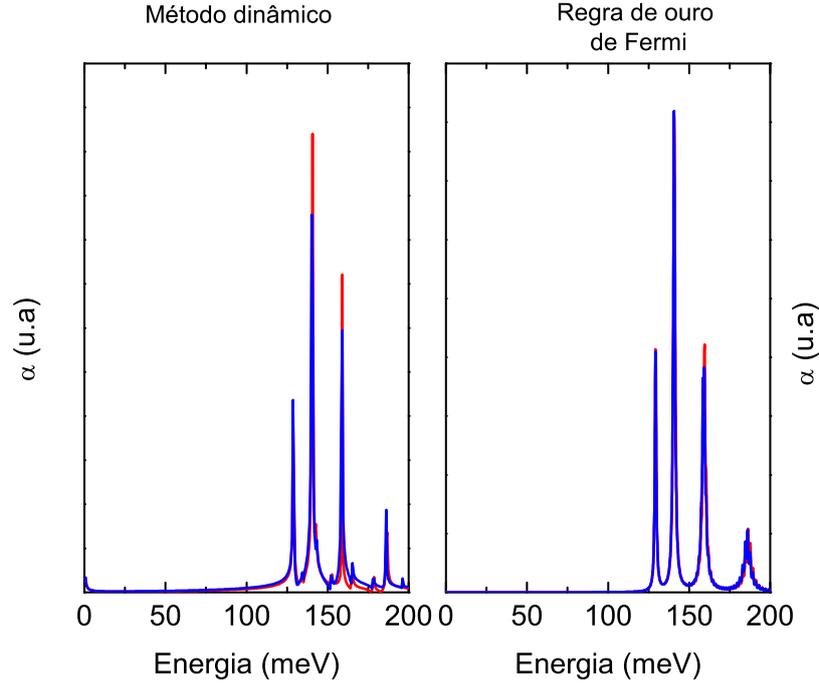


Figura 2.3: Espectro de absorção para ambos os spin, utilizando os dois métodos: (a) Via regra de ouro de Fermi e (b) dinâmico. Ambos os métodos apresentam o espectro de absorção consistente. O sistema tem quatro transições possíveis com a energia do campo incidente de até 200 meV. Nota-se que não é permitida a transição óptica entre os estados fundamentais dos poços quânticos. A maior probabilidade de transição ocorre aproximadamente em 140 meV, para ambas componentes do *spin*.

### 2.1.2 Fotocorrente com o campo de excitação

Por efeito da ação acumulativa do campo excitante, o elétron no estado inicial pode ser ionizado para os estados quase-ligados, podendo este tunelar através da BD e contribuir para a fotocorrente. De acordo com a seção 1.7.3, a fotocorrente é calculada através, da versão quântica, da equação de densidade de corrente

$$J_c(t) = \text{Real} \left[ \frac{\hbar}{im} \psi^\dagger(z, t) \frac{d\psi(z, t)}{dx} \right] \Big|_{z=\pm z_c}, \quad (2.3)$$

No qual  $z_c$  é uma região fora dos poços. A integral no tempo da diferença entre a fotocorrente gerada à esquerda e à direita fornece a fotocorrente total do sistema

$$I = \int_0^T [J_D(t) - J_E(t)] dt, \quad (2.4)$$

sendo T o tempo necessário para o elétron ser completamente ionizado do estado

fundamental do 1PQ [Maialle and Degani, 2011] que neste sistema foi de 4 ps.

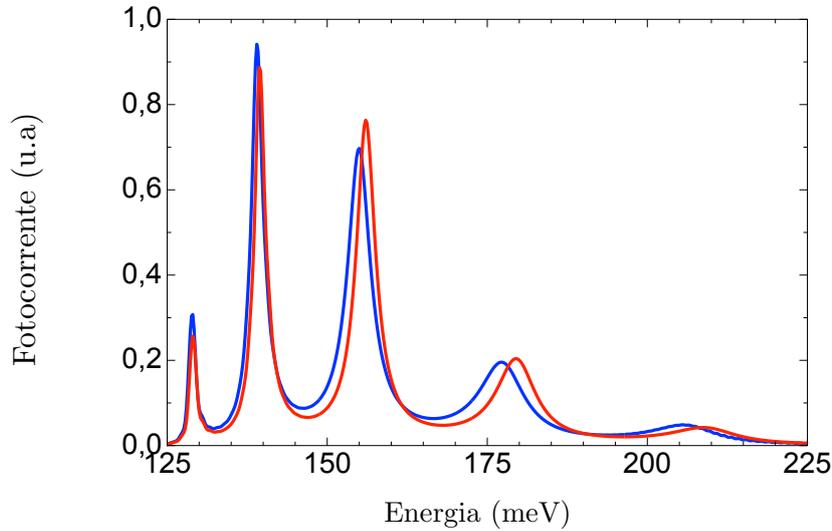


Figura 2.4: Fotocorrente, para componentes *down* e *up* do *spin*, em função da energia do campo de excitação com amplitude constante de 8 kV/cm. Cada pico do gráfico indica uma transição entre o estado fundamental para um estado de quase-ligado.

O espectro da fotocorrente, para a região entre 125 a 225 meV, está ilustrado na Figura 2.4. Seu perfil mostra uma série de picos de intensidade. Eles estão relacionados com as transições do estado fundamental do 1PQ para os estados quase-ligados, em concordância com o espectro de absorção da Figura 2.3. A geração da fotocorrente ocorre devido ao tunelamento desses estados para o *continuum* através da barreira fina BD. Independente da componente do *spin*, o pico de maior amplitude da fotocorrente encontra próximo da mesma energia, aproximadamente em 140 meV. A partir de agora, a região de interesse do espectro da fotocorrente será em torno desta região, 135-145 meV.

### 2.1.3 Fotocorrente com os campos de excitação e de aprisionamento

Até agora, foi estudado a geração da fotocorrente pelo elétron no estado fundamental do 1PQ por intermédio do campo excitante. A adição de outro campo oscilante, campo de aprisionamento, fornece uma nova e rica dinâmica para o sistema. Se este campo estiver sintonizado na energia de transição, do estado quase-ligado para o estado fundamental do segundo poço, existe a probabilidade do elétron ser aprisio-

namento no segundo poço. Esta é uma representação de um sistema de três níveis na configuração lambda ( $\Lambda$ ), isto é, o acoplamento entre dois estados ópticamente inacessíveis por meio de um terceiro estado.

A energia ressonante do campo de aprisionamento para as componentes do *spin down* e *up* são 111.70 meV e 97.70 meV, respectivamente. A energia de aprisionamento de cada componente de *spin* é inferior à energia de excitação, 140 meV, ou de qualquer outra transição do estado fundamental do 1PQ para qualquer outro estado no *continuum*. Portanto o campo de aprisionamento não participa do processo de excitação, logo sua única função na dinâmica é no aprisionamento do elétron do estado quase-ligado para o estado fundamental do 2PQ.

É ilustrada na Figura 2.5 o espectro da fotocorrente para *spin down* e *up*, incluindo na dinâmica o campo de aprisionamento de cada componente do *spin*. Dessa forma, é feito um estudo da resposta da fotocorrente em função do aumento da intensidade do campo de aprisionamento entre 0-20 kV/cm e a intensidade do campo de excitação constante em 6.0 kV/cm. A fotocorrente sem o campo de aprisionamento exibe um pico próximo de 140 meV, mas com o aumento da intensidade do campo de aprisionamento ocorre uma atenuação deste pico e o surgimento de um dubleto em torno desta energia. Mostrando que o aumento da intensidade do campo de aprisionamento faz que parte da função de onda do elétron não contribua para geração da fotocorrente, ficando presa dentro do sistema. Nesta figura fica evidente o surgimento do aprisionamento coerente de população na resposta da fotocorrente na condição ressonante e a sua forte dependência com a intensidade do campo de aprisionamento.

A porcentagem de atenuação da amplitude da fotocorrente em função da intensidade do campo de aprisionamento foi calculada por meio da fórmula

$$A(\%) = \frac{A_0 - A_{intensidade}}{A_0} * 100\%, \quad (2.5)$$

sendo  $A_0$  o valor da amplitude da fotocorrente sem o segundo campo aplicado,  $A_{Intensidade}$  a amplitude da fotocorrente na energia ressonante em relação a amplitude do campo de aprisionamento. As porcentagens de atenuação, para ambas componentes do *spin's*, está representada na Figura 2.6, quanto maior for amplitude maior será a atenuação da fotocorrente na energia ressonante. Em ambos os *spin's* o valor

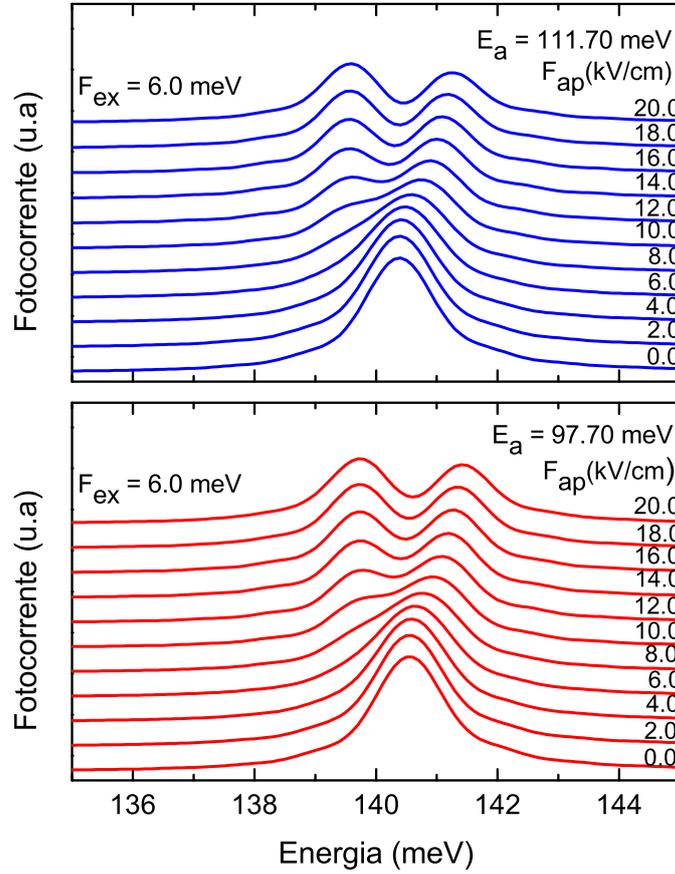


Figura 2.5: Espectro da fotocorrente para *spin down* (azul) e *up* (vermelho). O campo de aprisionamento foi sintonizado na energia de transição, 111.70 meV para *down* e 97.70 meV para *up*, e a intensidade foi variada entre 0 - 20 kV/cm. Os espectros foram deslocados verticalmente para uma melhor observação da atenuação do pico em função do aumento da intensidade.

máximo obtido de atenuação foi aproximadamente 80% e a partir de 16 kV/cm há o início da saturação no valor dessa atenuação.

Na figura 2.7 é comparada a fotocorrente gerada, para ambos os *spin's*, na condição ressonante de cada *spin's*. Na configuração do aprisionamento coerente de população da componente *down*, conforme visto antes, há uma atenuação da fotocorrente *down*, em 140 meV, enquanto a fotocorrente *up* tem sua amplitude máxima nessa energia. O mesmo comportamento é observado na condição ressonante para *spin up*. Fica evidente o potencial uso do CTP para a geração de fotocorrente polarizada em *spin*, pois quando uma componente de *spin* é aprisionada a outra é livre para gerar fotocorrente.

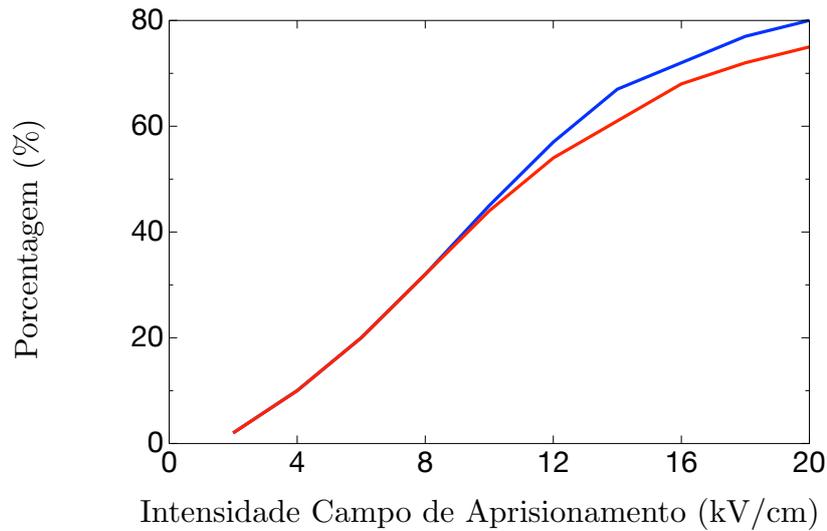


Figura 2.6: Porcentagem de atenuação da intensidade da fotocorrente na energia de transição 140 meV em função da intensidade do campo de aprisionamento para ambas componentes do *spin down* (azul) e *spin up* (vermelho).

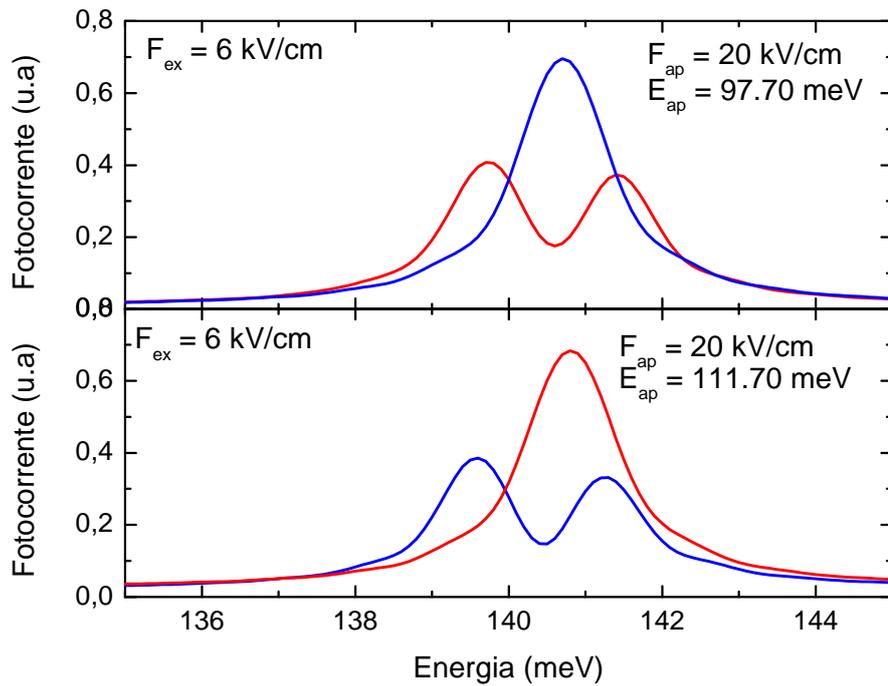


Figura 2.7: Espectro da fotocorrente com o campo de aprisionamento sintonizado na frequência oposta do seu *spin*, fotocorrente do *spin down* (*spin up*) com frequência de aprisionamento do *spin up* (*spin down*).

Até agora, a energia do campo de aprisionamento foi mantida constante no regime ressonante. A variação desta energia em torno desta região fornece informação de quão

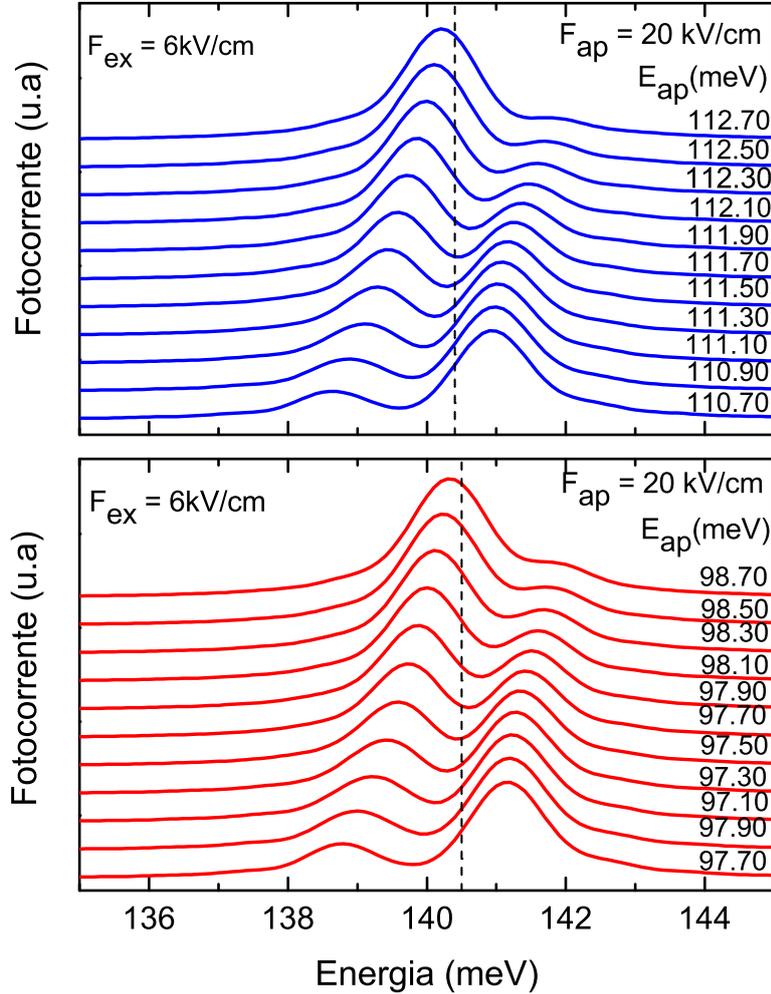


Figura 2.8: Espectro da fotocorrente para *spin down* (azul) e *up* (vermelho). A energia do campo de aprisionamento foi variado entre 1meV em torno da energia ressonante. A linha pontilhada serve como guia aos olhos da energia do pico da fotocorrente sem o campo de aprisionamento. Os espectros foram deslocados na vertical para uma melhor observação do deslocamento do vale na fotocorrente.

sensível é o fenômeno do CTP na fotocorrente. Na Figura 2.8 está apresentado os espectros das fotocorrentes com as amplitudes dos campos constantes em  $F_{ex} = 6.0\text{ kV/cm}$  e  $F_{ap} = 20.0\text{ kV/cm}$  e a energia do campo de aprisionamento foi variado 1.0 meV em torno da energia ressonante. Em ambos os gráficos ocorrem o deslocamento do vale da à esquerda para à direita em torno da região ressonante. Com isso é visto que esse o efeito é um fenômeno de interferência quântica, pois um pequeno desvio

da energia ressonante já desconfigura o sistema.

Um bom filtro do *spin* precisa bloquear uma dada componente do *spin* enquanto a outra é livre para gerar fotocorrente. Desse maneira, foi calculada a polarização de *spin* em função da energia de aprisionamento através da equação

$$P (\%) = \frac{I_{\uparrow} - I_{\downarrow}}{I_{\uparrow} + I_{\downarrow}}, \quad (2.6)$$

sendo  $I_{\uparrow}$  a fotocorrente *up* e  $I_{\downarrow}$  a fotocorrente *down*. A figura 2.9 mostra as polarizações, *down* e *up*, para as frequências de aprisionamento em função intensidade desse campo. Quando a energia de aprisionamento é ajustada para o *spin down* ocorre que quanto maior for a intensidade maior será a polarização *down* em 140 meV aproximadamente. O mesmo processo é observado quando a energia do campo de aprisionamento é ajustada para o *spin up*. A mudança na frequência de aprisionamento de um *spin* para o outro, a polarização é completamente reversa de aproximadamente 50% para -50%.

### 2.1.4 Ocupação com o campo de excitação

Até esse momento foi realizado o estudo desse sistema no domínio das energias, por meio da resposta da fotocorrente quando é incorporado na dinâmica dois campos sintonizados para a configuração  $\Lambda$ , verificando o decréscimo da amplitude da fotocorrente. Este domínio não fornece informação acerca da dinâmica do elétron nesta condição, apenas o conhecimento que ele não está gerando fotocorrente sem saber sua provável localização.

O cálculo da ocupação, descrito na seção 1.7.4, fornece a informação sobre o autoestado mais provável que a função de onda do elétron evoluída tempo se encontra. A ocupação foi definida como

$$\rho_n(t) = \left| \int_0^{\infty} \phi_n^*(z) \psi(z, t) dz \right|^2, \quad (2.7)$$

no qual  $\phi_n(z)$  é o autoestado que será projetado a função de onda evoluída e  $\psi(z, t)$  a função de onda evoluída no tempo. Em todas as simulações, o elétron está inicialmente no estado fundamental do 1PQ.

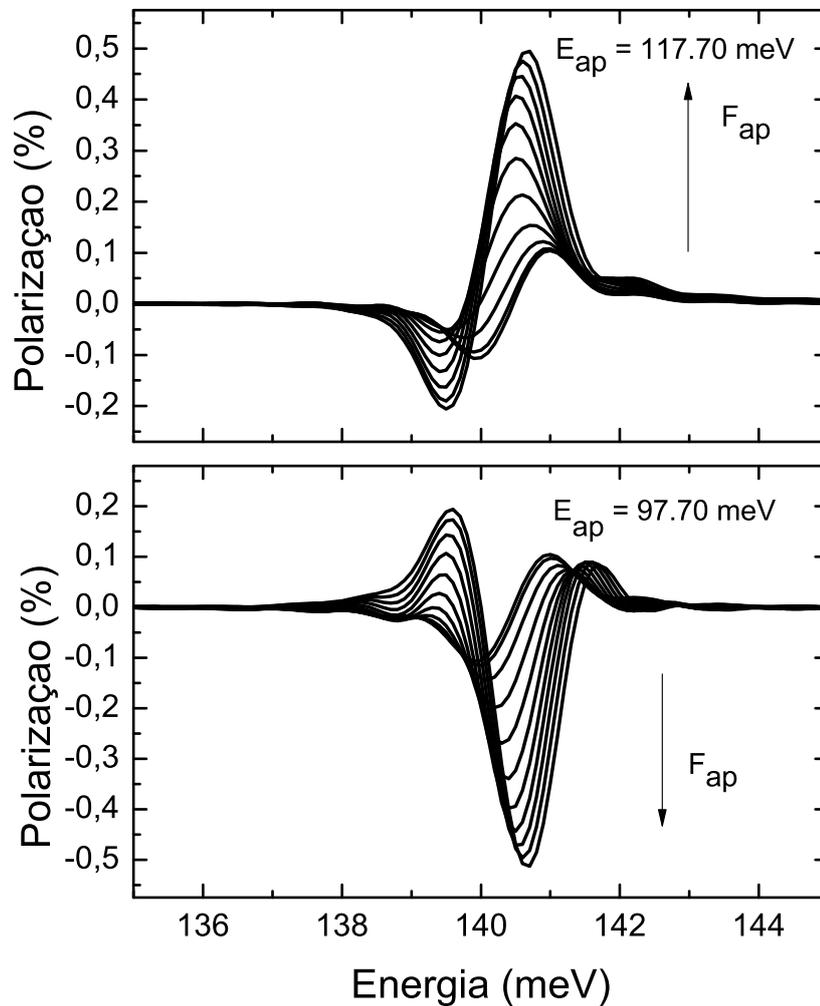


Figura 2.9: Espectro da fotocorrente para *spin down* com o campo de aprisionamento sintonizado na energia para *spin up*.

Nas figuras 2.10 e 2.11 estão representadas as ocupações, *spin down* e *up*, do elétron no estado fundamental do 1PQ na presença do campo de excitação em função da variação da amplitude do campo de 4 -14 kV/cm. Há um comportamento padrão em todas as amplitudes: no início a ocupação do estado fundamental está completa mas, devido ao campo excitante, ocorre a transição para o estado quase-ligado, observando o decréscimo da ocupação do estado fundamental. Quanto maior é a amplitude mais rápido é o processo de ionização desse estado. Nota-se que a partir de 8 kV/cm a ocupação do estado fundamental tende a oscilar até que seu valor torne-se nulo, esta oscilação é conhecida como oscilações de Rabi. Este fenômeno acontece sempre

que há dinâmica entre dois estados quânticos, pois o elétron fica trocando de estado quântico continuamente. O amortecimento das oscilações ocorre devido ao processo de tunelamento da função de onda para o contínuo por meio da pequena barreira BD, fazendo com que parte da função tunele para além da região ressonante.

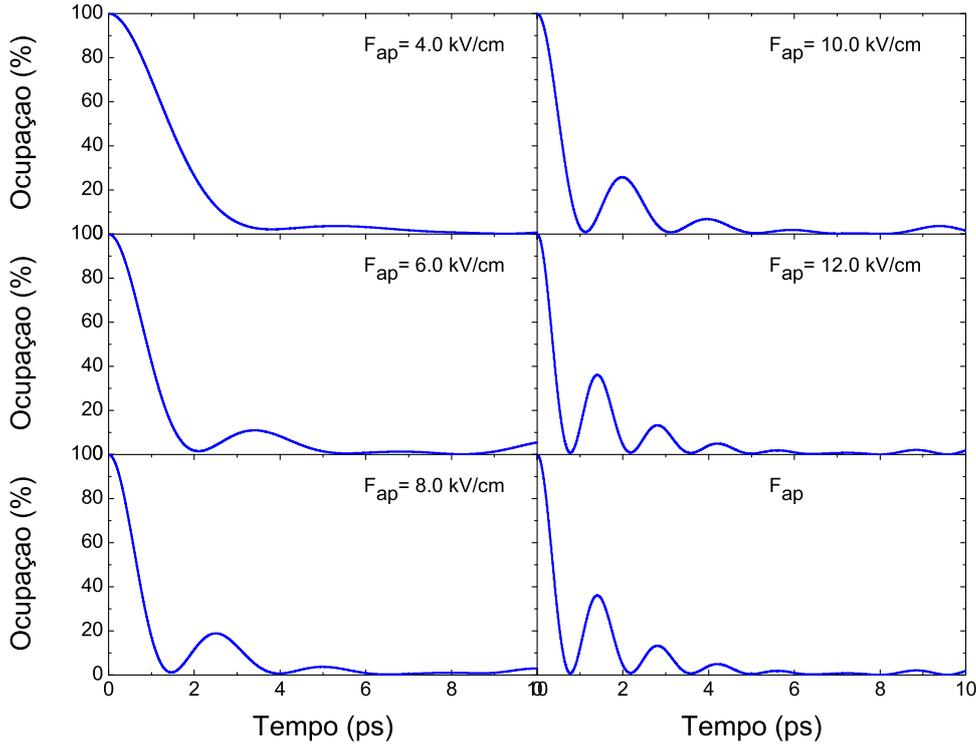


Figura 2.10: Ocupação do estado fundamental do 1PQ para *spin down*, na condição ressonante entre ele e o estado quase-ligado, em função do tempo. A intensidade do campo de excitação foi variada entre 4-14 kV/cm. No início da simulação, o elétron encontra-se no estado fundamental do 1PQ mas, com o passar do tempo a ocupação do estado fundamental diminui, mostrando a ionização completa do elétron. As oscilações da ocupação estão relacionadas com a frequência de Rabi, um fenômeno que ocorre sempre que há dinâmica entre dois estados quânticos.

### 2.1.5 Ocupação com os campos de excitação e de aprisionamento

A adição do segundo campo no sistema fornece uma dinâmica totalmente nova e rica, pois é possível adicionar um terceiro estado acessível ao sistema, o estado fundamental do segundo poço. O elétron no estado quase-ligado pode ser aprisionado

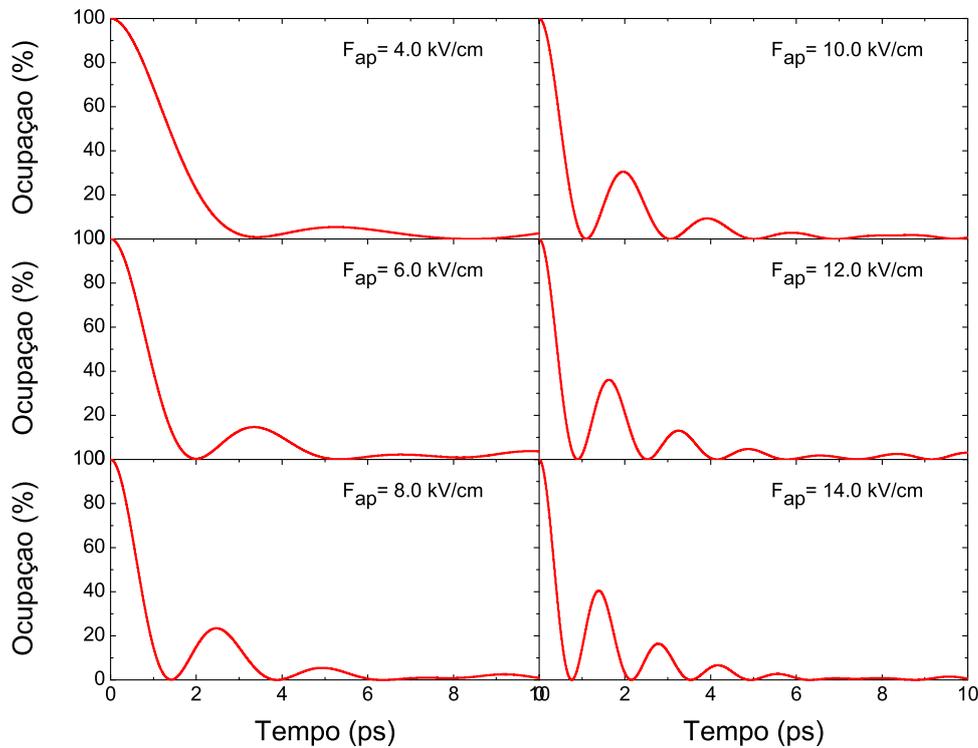


Figura 2.11: Ocupação do estado fundamental do 1PQ para *spin up*, na condição ressonante entre ele e o estado quase-ligado, em função do tempo. A intensidade do campo de excitação foi variada entre 4-14 kV/cm. No início da simulação, o elétron encontra-se no estado fundamental do 1PQ mas, com o passar do tempo a ocupação do estado fundamental diminui, mostrando a ionização completa do elétron. As oscilações da ocupação estão relacionadas com a frequência de Rabi, um fenômeno que ocorre sempre que há dinâmica entre dois estados quânticos.

no segundo poço se a energia do campo de aprisionamento for ressonante para esta transição.

Nas Figuras 2.12 e 2.13 estão representadas as ocupações, *spin down* e *up*, dos três estados, mantendo a intensidade do campo de excitação fixa em 6 kV/cm e variando a intensidade do campo de aprisionamento entre 4 - 14 kV/cm. No início da evolução temporal, a função de onda do elétron se encontra no estado fundamental do primeiro poço, curva roxa. Devido ao campo de excitação, ocorre a transição do elétron para o estado quase-ligado, curva marrom, o campo de aprisionamento faz com que o elétron fique preso no segundo poço, curva verde. Como esperado, a ocupação do estado 2PQ somente começa ser considerável após a ocupação do estado quase-ligado ter um valor significativo. Quanto maior é a intensidade do campo de aprisionamento maior

será a amplitude da ocupação no 2PQ, o oposto ocorre com a ocupação do estado quase-ligado que diminui com o aumento da intensidade. A fotocorrente é gerada pelo estado de quase-ligado, assim quanto menos esse estado quase-ligado é ocupado menor será a fotocorrente. Portanto, o decréscimo da amplitude da fotocorrente, no regime ressonante, em função do aumento da intensidade do campo de aprisionamento está relacionada com a baixa probabilidade de o elétron ocupar o estado quase-ligado e a grande probabilidade que ele seja aprisionado no estado fundamental de cada poço quântico. Para alta intensidade do campo de aprisionamento ocorre a formação do estado escuro, um estado que é uma combinação linear da função de onda de cada poço quântico, bloqueando a transição entre o estado fundamental do 1PQ com o estado quase-ligado.

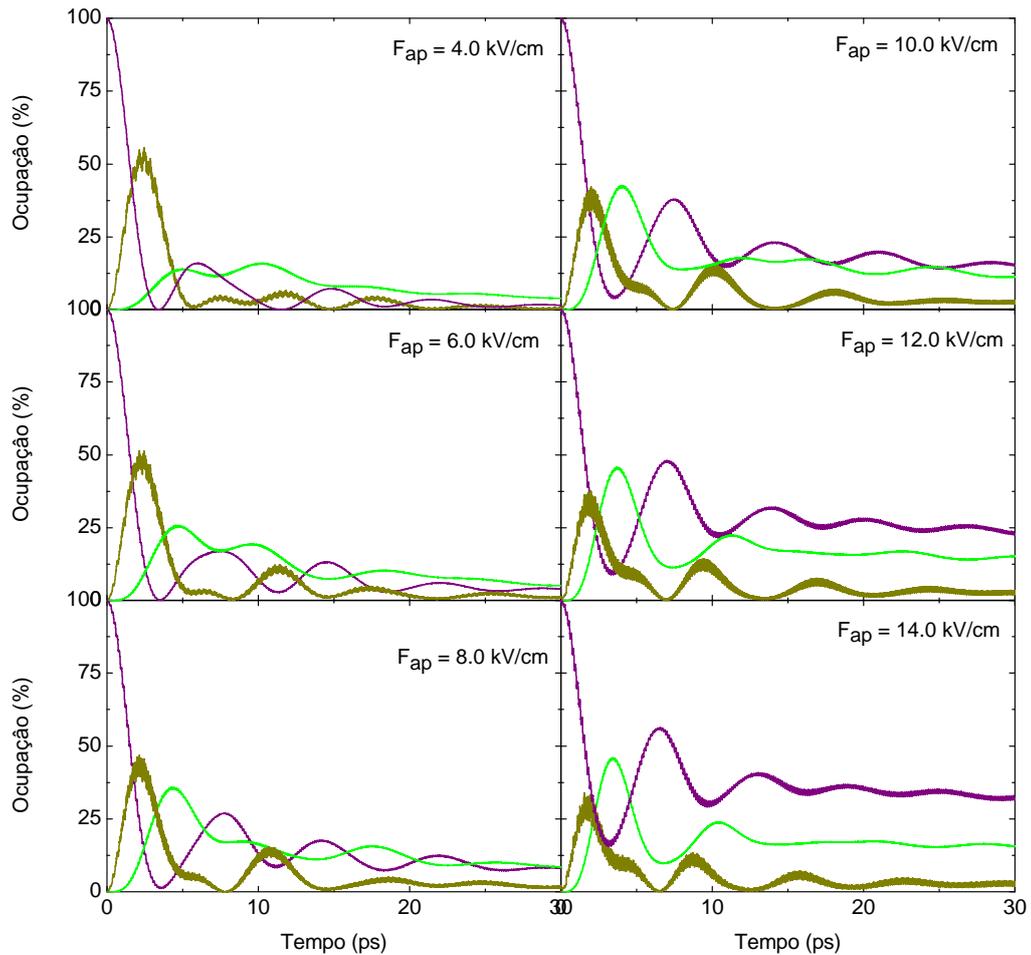


Figura 2.12: Ocupação da componente *spin down*, em função do tempo dos seguintes estados: primeiro poço (curva roxa), quase-ligado (curva marron) e segundo poço (curva verde). Os campos de excitação e aprisionamento foram ajustados para configuração  $\Lambda$ . A intensidade do campo de excitação foi mantida constante em 6 kV/cm e a intensidade do campo de aprisionamento foi variada entre 4 - 14 kV/cm. Quanto maior é intensidade do campo de aprisionamento maior será a ocupação do segundo poço.

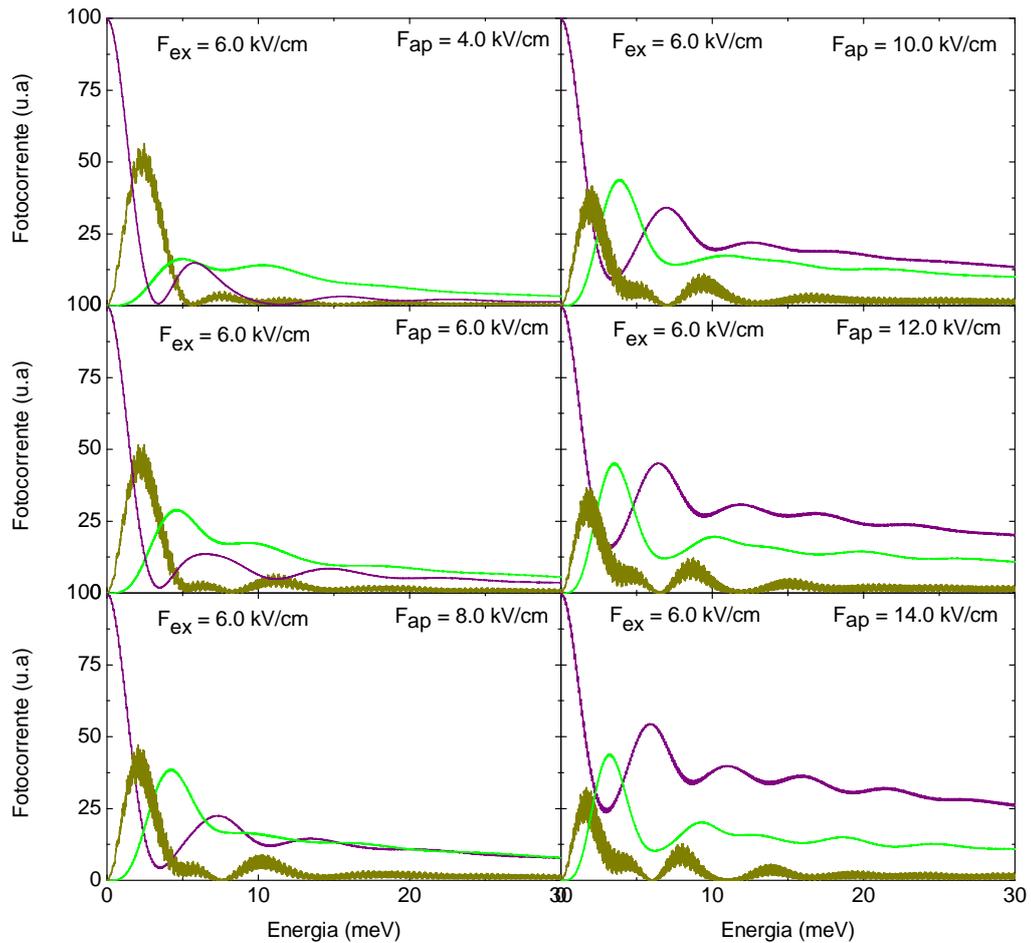


Figura 2.13: Ocupação da componente *spin up*, em função do tempo dos seguintes estados: primeiro poço (curva roxa), quase-ligado (curva marron) e segundo poço (curva verde). Os campos de excitação e aprisionamento foram ajustados na configuração  $\Lambda$ . A intensidade do campo de excitação foi mantida constante em 6 kV/cm e a intensidade do campo de aprisionamento foi variada entre 4 - 14 kV/cm. Quanto maior é intensidade do campo de aprisionamento maior será a ocupação do segundo poço.

## 2.2 Poço quântico duplo acoplado

### 2.2.1 Detalhe da heteroestrutura

Nesta seção será apresentada a segunda heteroestrutura proposta para a geração da fotocorrente polarizada em *spin*. A heteroestrutura é formada por dois poços quânticos acoplado: poço quântico 1 (1PQ) de 8 nm e poço quântico 2 (2PQ) de 8 nm, sendo este dopado com manganês Mn. Entre os poços há uma fina barreira central (BC) de 4 nm. À esquerda do (1PQ) há um potencial barreira (BE) de 240 nm para reduzir a probabilidade de corrente nesta direção e à direita uma pequena barreira (BD) de 1.5 nm conectado a um contínuo de estados (CT) de 750nm. A composição química de cada camada da heteroestrutura e o potencial gerado na banda condução estão esquematizados na Figura 2.14.

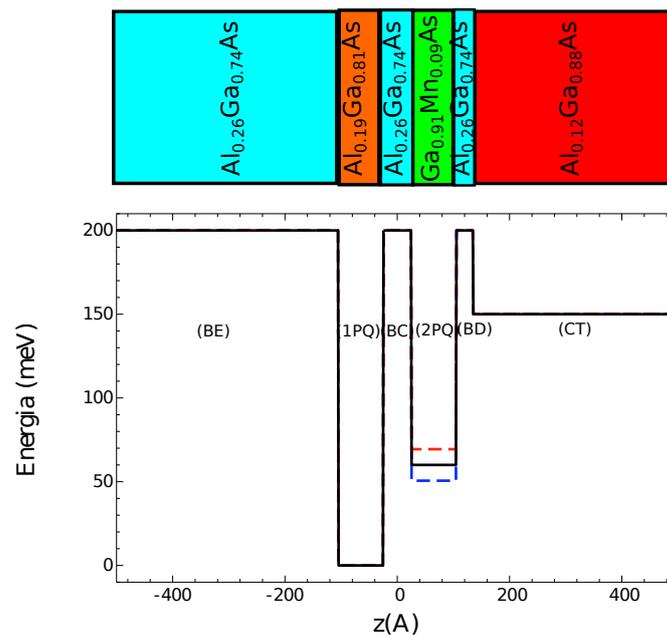


Figura 2.14: (a) Visão perpendicular ao crescimento da segunda heteroestrutura proposta com a composição de cada camada e seu tamanho. (b) Perfil da banda de condução na direção de crescimento. A estrutura é composta por dois poços quânticos acoplados, 1PQ e 2PQ. O 2PQ é feito com GaMnAs, um semiconductor magnético diluído, quando é aplicado campo magnético externo na direção de crescimento ocorre a quebra de degenerescência em *spin*. O potencial dependente do *spin* do elétron é representado nas linhas tracejadas, vermelho *spin up* e azul *spin down*

O mesmo procedimento aplicado no primeiro dispositivo, seção 2.1, para obter a fotocorrente *spin* polarizada será utilizado neste dispositivo.

Os autoestados dessa heteroestrutura foram calculados pelo método *Fourier Hamiltonian Grid* (apêndice B). Cada poço foi projetado para suportar apenas um autoestado e um estado quase-ligado no primeiro poço, esse estado será responsável para a geração de fotocorrente. Os autoestados e seu respectivo *power spectrum* estão representados na figura 2.15(a) para elétron com *spin down* (azul) e (b) para elétron com *spin down* (vermelho). O estado quase-ligado foi evidenciado dentre os estados no *continuum*. A camada de DMS modifica a profundidade do segundo poço, fazendo com que a autoenergia do estado fundamental do 2PQ seja diferente para cada componente do *spin* do elétron, sendo essa diferença nos autoestados o ponto crucial da geração de fotocorrente polarizada em *spin*. O *power spectrum* de cada componente de *spin* está à direita do gráfico dos autoestados. Conforme visto na primeira heteroestrutura, cada pico no gráfico do *power spectrum* representa o autoestado com aquela autoenergia.

Conforme visto na seção 2.1, o espectro de absorção pode ser obtido por dois métodos, via regra de ouro de Fermi e o método dinâmico. Na Figura 2.16 é apresentado o espectro de absorção para *spin up* e *down* utilizando esses métodos.

A heteroestrutura apresenta três estados ópticamente acessíveis para ambos os *spin's*, sendo a maior probabilidade de transição ocorre aproximadamente em 110 meV, essa energia corresponde à transição entre o estado fundamental e o estado quase-ligado no 1PQ. A transição entre os estados fundamentais dos poços quânticos são ópticamente acessível mas esses estados não são capazes de gerar fotocorrente por serem estados confinados. Para ambos os *spin's*, a energia de transição de maior probabilidade é a mesma, ou seja, um único campo oscilante de excitação faz a transição para ambos os *spin's*.

Na próxima seção será apresentada a fotocorrente utilizando o campo de excitação.

### 2.2.2 Fotocorrente com o campo de excitação

O espectro da fotocorrente com o campo de excitação de 6 kV/cm para a região entre 50 - 150 meV está ilustrada na Figura 2.17. Seu perfil mostra um único pico de intensidade em 110 meV. Ele está relacionado com a transição do estado fundamental para o estado quase-ligado, em concordância com o espectro de absorção da figura

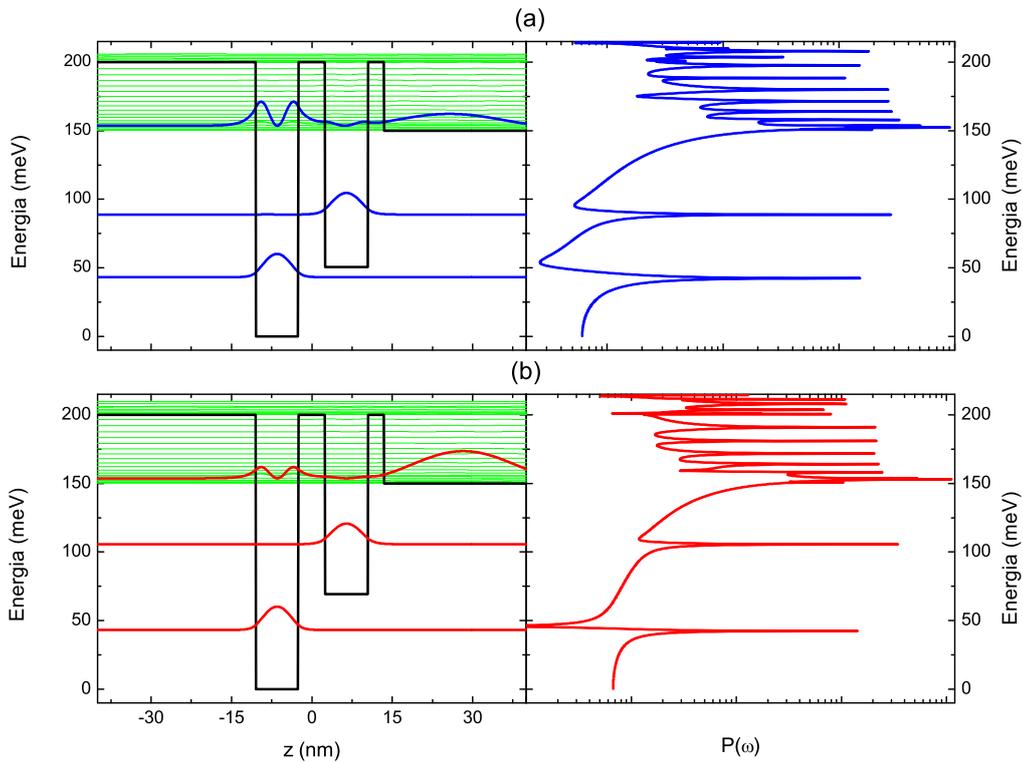


Figura 2.15: (a) Perfil de potencial da estrutura 2 para o elétron com *spin down*. Esse sistema permite dois estados ligados, um estado em cada poço quântico, e um estado excitado quase-ligado no primeiro poço. (b) Perfil de potencial para o elétron *spin up* e seu respectivo *power spectrum*.

2.16. A energia da maior amplitude na fotocorrente, de cada componente do *spin*, ocorre em 109.30 meV para *spin down* e 110.50 meV para *spin up*. A partir de agora, a região de interesse do espectro da fotocorrente será em torno desse pico.

### 2.2.3 Fotocorrente com os campos de excitação e de aprisionamento

A energia ressonante do campo de aprisionamento para as componentes de *spin down* e *up* são 62.20 meV e 47.20 meV. Estas duas energias são inferiores a energia de excitação, sendo impossível que o campo de aprisionamento participe no processo excitação do elétron.

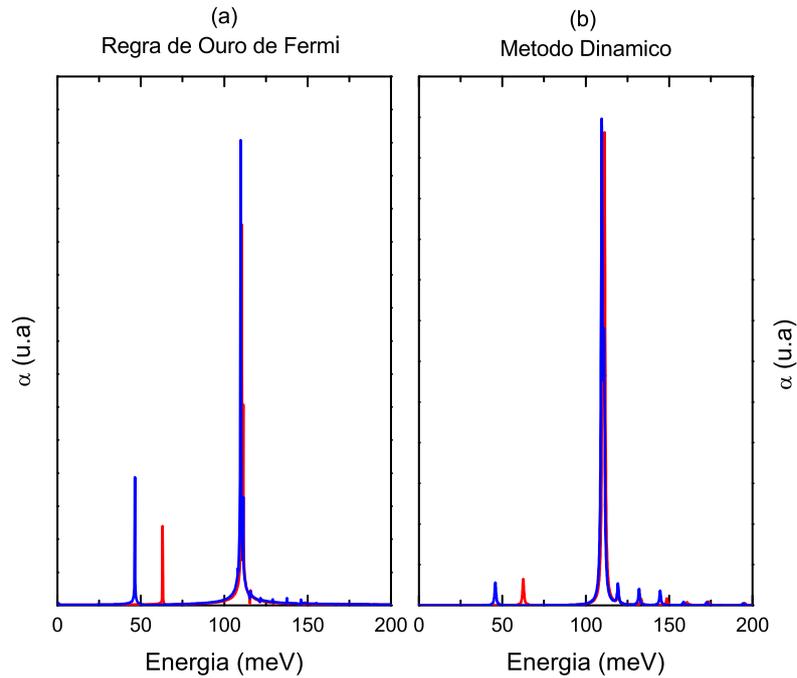


Figura 2.16: Espectro de absorção para ambos os *spin* utilizando os dois métodos: (a) Via regra de ouro de Fermi e (b) Método Dinâmico. Ambos os métodos apresentam o espectro de absorção consistente. O sistema apresenta três transições possíveis com a energia do feixe incidente de até 200 meV. A transição de maior probabilidade ocorre entre o estado fundamental e o estado quase-ligado e é possível a transição entre os estados fundamentais mas, esses estados não contribuem para a geração de fotocorrente.

É ilustrada na figuras 2.18 o espectro da fotocorrente para *spin down* e *up*, incluindo na dinâmica o campo de aprisionamento de cada componente de *spin*. A intensidade do campo de aprisionamento foi variada de 0 a 20 kV/cm e a intensidade do campo de excitação constante em 6.0 kV/cm. A fotocorrente sem o campo de aprisionamento exibe um pico próximo de 110.0 meV, mas com o aumento da intensidade ocorre uma atenuação deste pico, dando origem a um dubleto em torno desta energia. O aumento da intensidade do campo de aprisionamento faz que parte da função de onda do elétron não contribua para geração da fotocorrente.

Na Figura 2.19 é comparada a fotocorrente gerada, para ambos os *spin's*, na condição ressonante de cada *spin*. Na configuração do aprisionamento coerente de população da componente *down*, conforme visto antes, há uma atenuação na fotocorrente *down*, em 140 meV, enquanto a fotocorrente *up* tem sua amplitude máxima nessa energia. Por outro lado, na condição ressonante para *up* o valor máxima da

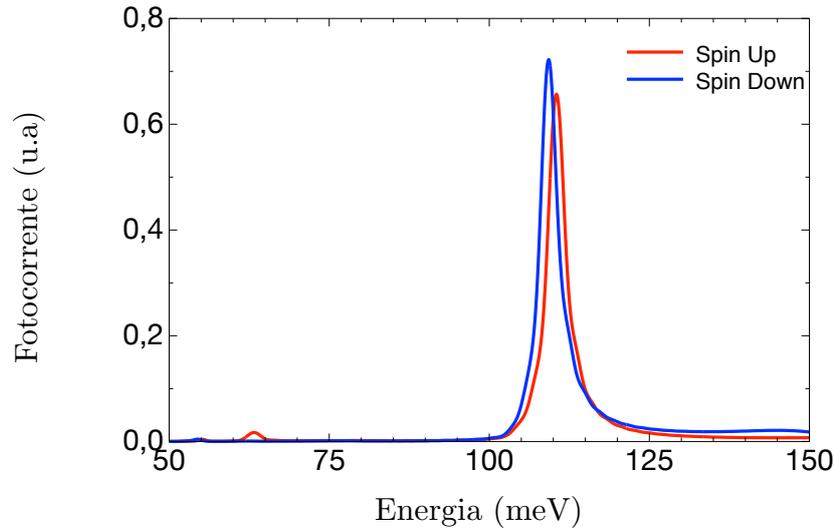


Figura 2.17: Fotocorrente, para as componentes de *spin down* e *up*, em função da energia do campo de excitação com amplitude de 6 kV/cm. O gráfico apresenta um pico de grande intensidade em 109.30 meV para *spin down* e 110.50 para *spin up* que está relacionado com transição entre o estado fundamental para o estado excitado quase-ligado.

fotocorrente *down* não ocorre na mesma energia da atenuação *down*, seu valor é deslocado para à direita. Em comparação com esse gráfico da heteroestrutura 01 2.7, parece que a estrutura com poços quânticos desacoplados é uma candidata melhor para a geração de fotocorrente polarizada em *spin*.

As porcentagens de atenuação, definida na equação 2.6, para ambas componentes de *spin*, está representada na Figura 2.20. Quanto maior for amplitude do campo de aprisionamento maior será a atenuação da fotocorrente na energia ressonante. Em ambos os *spin's* o valor máximo obtido de atenuação foi aproximadamente 80%.

Na figura 2.21 está ilustrada as fotocorrentes com as amplitudes dos campos constantes em  $F_{ex} = 6.0$  kV/cm e  $F_{ap} = 20.0$  kV/cm e a energia do campo de aprisionamento foi variada 1.0 meV em torno da energia ressonante. Em ambos os casos, ocorre o deslocamento do mínimo local da fotocorrente da esquerda para à direita em torno da região ressonante.

A polarização da fotocorrente, equação 2.6, de cada energia de aprisionamento fornece informação sobre a viabilidade da estrutura gerar fotocorrente polarizada em *spin*. A polarização de cada componente de *spin* em função do aumento da amplitude do campo de aprisionamento pode ser visto na figura 2.22. Para a energia de

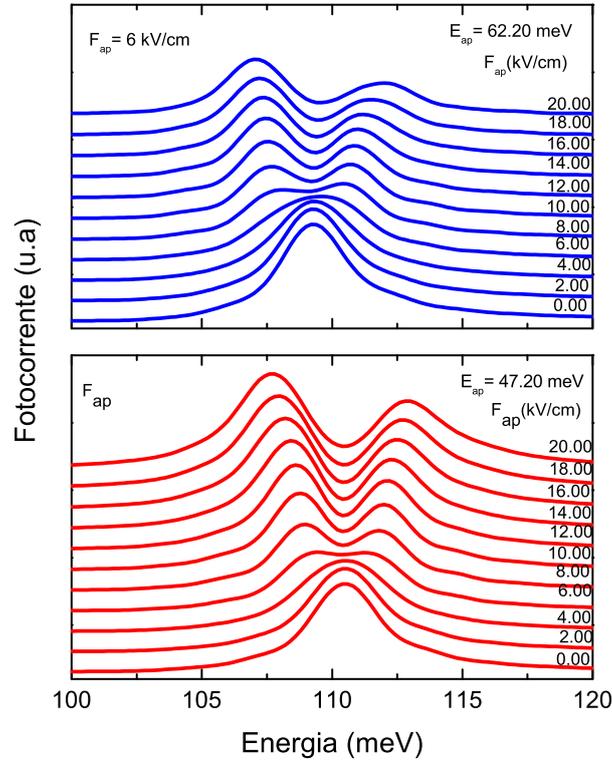


Figura 2.18: Espectro da fotocorrente para *spin down* (azul) e *up* (vermelho). O campo de aprisionamento foi sintonizado na energia de transição, 62.20 meV para *spin down* e 47.20 meV para *up*, e a amplitude foi variada entre 0-20 kV/cm. Os espectros foram deslocados verticalmente para uma melhor observação da atenuação do pico em função do aumento da intensidade.

aprisionamento da componente *down*, 67.20 meV, a polarização em função da amplitude do campo de aprisionamento exibe um pico principal próximo de 110 meV. Esse pico mostra que nessa energia a intensidade da fotocorrente *down* diminui enquanto a fotocorrente *up* não. Isso ocorre devido a polarização ser definida como proporcional a diferença entre as fotocorrentes,  $I_{\uparrow} - I_{\downarrow}$ . O segundo pico surge devido o alongamento da fotocorrente em grandes amplitudes do campo, pois quando é computada a diferença entre as fotocorrentes surge esse pico com polarização negativa, com uma energia diferente do pico da fotocorrente. O mesmo comportamento é observado para com a energia de aprisionamento *up* mas, agora a polarização na energia de 110 meV é negativa e polarização do segundo pico é positiva devido ao alargamento da fotocorrente *up*.

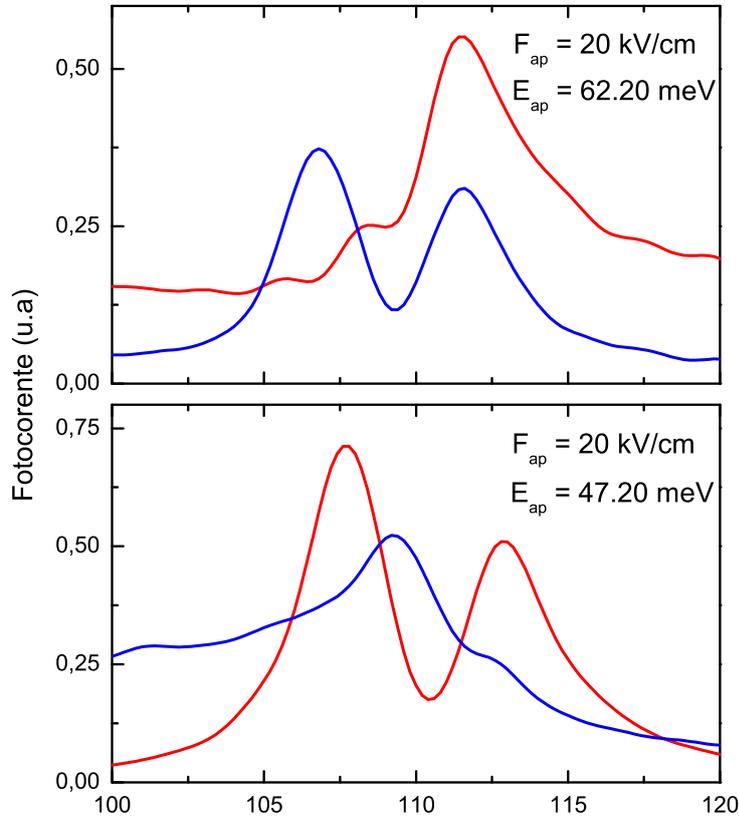


Figura 2.19: Espectro da fotocorrente com o campo de aprisionamento sintonizado na frequência oposta do seu *spin*, fotocorrente de *spin down* (*spin up*) com frequência de aprisionamento de *spin up* (*spin down*).

#### 2.2.4 Ocupação com o campo de excitação

Nas Figuras 2.23 e 2.24 estão representadas as ocupações, para *spin down* e *up*, do elétron no estado fundamental do primeiro poço na presença do campo de excitação, variando a amplitude do campo entre 4 - 14 kV/cm. Há um comportamento padrão em todas as amplitudes, no início a ocupação do estado fundamental é unitária mas, devido ao campo de excitação, ocorre a transição para o estado quase-ligado, observando o decréscimo na ocupação do estado fundamental. Quanto maior é a amplitude mais rápido é o processo de ionização do estado fundamental, nota-se que a partir de 8 kV/cm a ocupação do estado fundamental tenda a oscilar até que seu valor torne nulo, esta oscilação é conhecida como oscilações de Rabi.

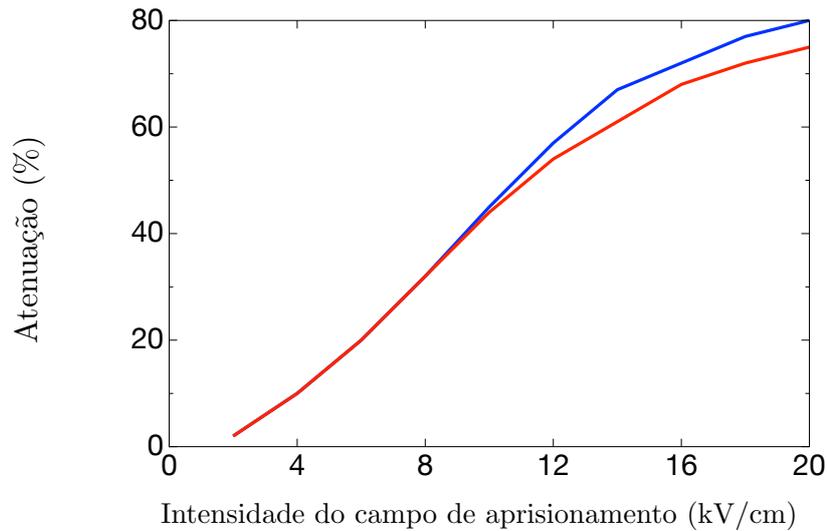


Figura 2.20: Porcentagem de atenuação da intensidade da fotocorrente em função da intensidade do campo de aprisionamento para ambas componentes de *spin*.

### 2.2.5 Ocupação com os campos de excitação e de aprisionamento

Nas Figuras 2.25 e 2.26 estão representadas as ocupações, para *spin down* e para *spin up*, dos três estados, o estado fundamental do 1PQ (curva roxa), o estado quase-ligado (curva marrom) e o estado fundamental do 2PQ (curva verde). A intensidade do campo de excitação constante em 6 kV/cm e a intensidade do campo de aprisionamento foi variada de 4 a 14 kV/cm. No início da evolução temporal, a função de onda do elétron se encontra no estado fundamental do primeiro poço, (curva roxa), mas devido à ação acumulativa do campo de excitação há a transição do elétron para o estado quase-ligado, (curva marrom). Como esperado, a ocupação do estado quase-ligado diminui com o aumento da intensidade do campo de aprisionamento, mostrando que pouca parte da função de onda do elétron se encontra nesse estado. O campo de aprisionamento faz com que o elétron fique preso numa superposição linear de cada estado fundamental. A fotocorrente é gerada pelo estado quase-ligado, assim quanto menor esse estado é ocupado menor será a fotocorrente. Portanto, o decréscimo da amplitude da fotocorrente, no regime ressonante, em função do aumento da intensidade do campo de aprisionamento está relacionada com criação do estado escuro onde o elétron se torna aprisionado dentro dos poços. A formação desse estado escuro fica evidente com valores altos da intensidade do campo de aprisionamento.

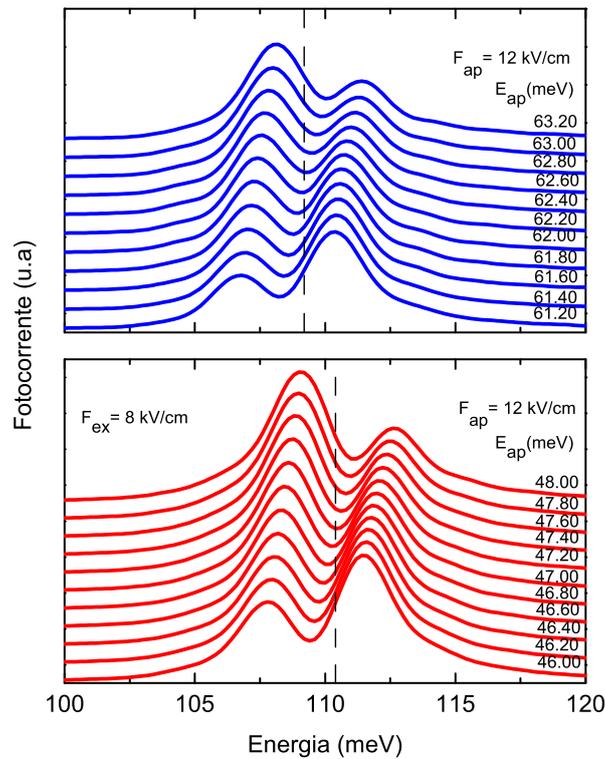


Figura 2.21: Espectro da fotocorrente para *spin down* e *up*. A energia do campo de aprisionamento foi variado de 1 meV em torno da energia ressonante 62.20 meV para *spin down* e 47.20 meV para *spin up*. A linha pontilhada serve como guia aos olhos da energia do pico da fotocorrente sem o campo de aprisionamento. Os espectros foram deslocados na vertical para uma melhor observação do deslocamento do vale na fotocorrente.

mento, a ocupação de cada estado fundamental tende a ser constante na evolução temporal.

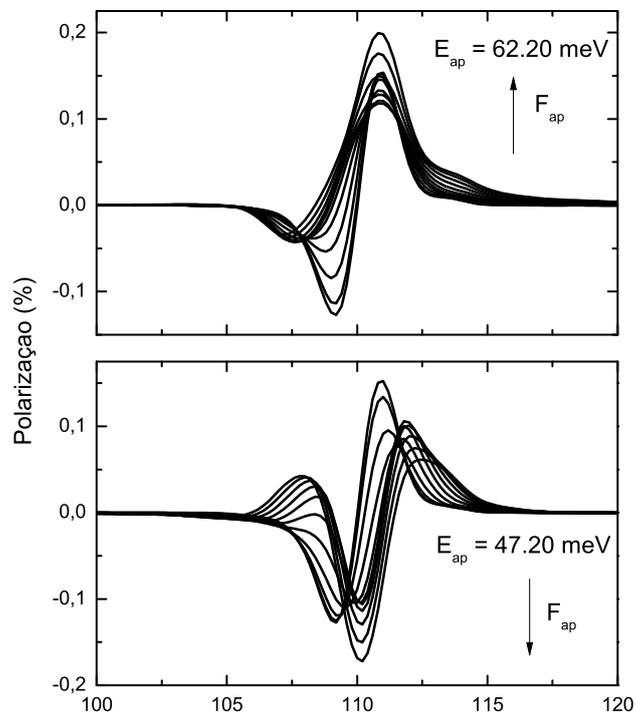


Figura 2.22: Polarização da fotocorrente em função da intensidade do campo de aprisionamento ajustado para aprisionar a componente *spin up*. O gráfico mostra que a polarização do *spin down*, linha azul, não é afetada pelo campo o aprisionamento da componente *spin up*, como acontece com a polarização componente *spin up*.

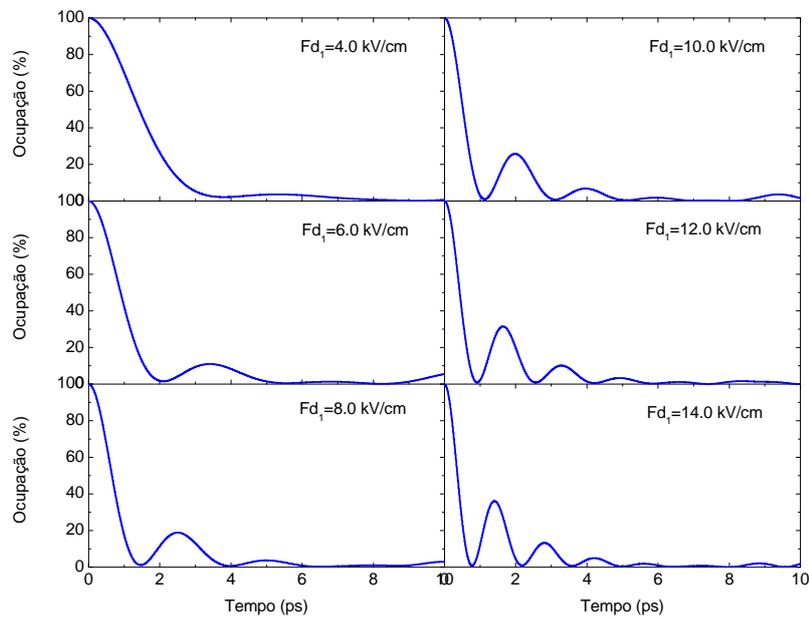


Figura 2.23: Ocupação do estado fundamental do 1PQ para a componente *spin down*, em função do tempo, na condição ressonante entre o estado inicial e o estado quase-ligado. No início, o elétron encontra-se no estado fundamental do 1PQ, mas devido à ação acumulativo do campo de excitação, a ocupação do estado fundamental diminui, levando a ionização completa do elétron. As oscilações da ocupação estão relacionadas com as oscilações de Rabi, um fenômeno que ocorre sempre que há dinâmica entre dois estados quânticos.

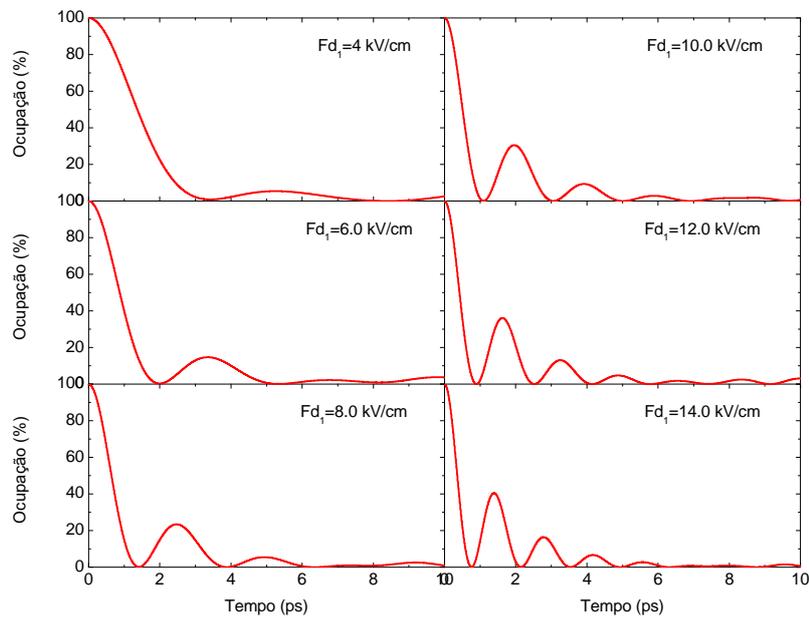


Figura 2.24: Ocupação do estado fundamental do 1PQ para a componente *spin up*, em função do tempo, na condição ressonante entre o estado inicial e o estado quase-ligado. No início, o elétron encontra-se no estado fundamental do 1PQ, mas devido à ação acumulativo do campo de excitação, a ocupação do estado fundamental diminui, levando a ionização completa do elétron. As oscilações da ocupação estão relacionadas com as oscilações de Rabi, um fenômeno que ocorre sempre que há dinâmica entre dois estados quânticos.

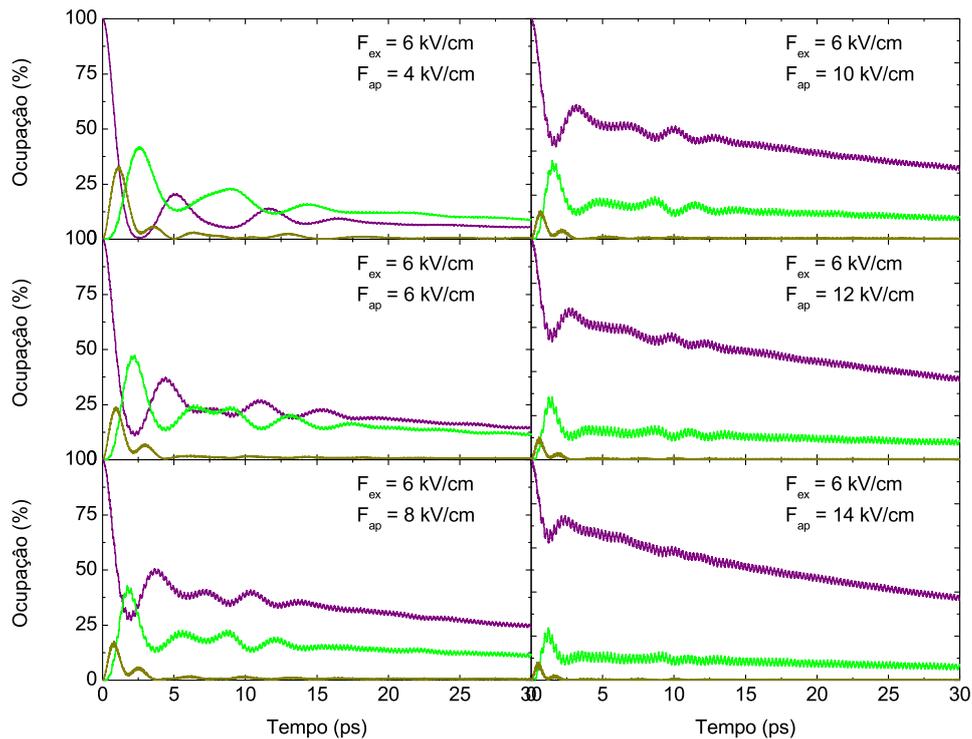


Figura 2.25: Ocupação para a componente de *spin down*, em função do tempo dos seguintes estados: estado fundamental do primeiro poço, (curva roxa), o estado quase-ligado (curva marrom) e o estado fundamental do segundo poço (curva verde). Os campos de excitação e aprisionamento foram sintonizadas na configuração  $\Lambda$ . A intensidade do campo de excitação foi mantida constante em 6 kV/cm e a intensidade do campo de aprisionamento foi variada entre 4 - 14 kV/cm. O aumento da amplitude do campo de aprisionamento faz com que a ocupação do estado quase-ligado (curva marrom) diminui-se ao ponto de ser quase nula, por outro lado as ocupações do estado fundamental do primeiro poço (curva roxa) e o estado fundamental do segundo poço mantidas quase constantes, evidenciando a formação do estado escuro.

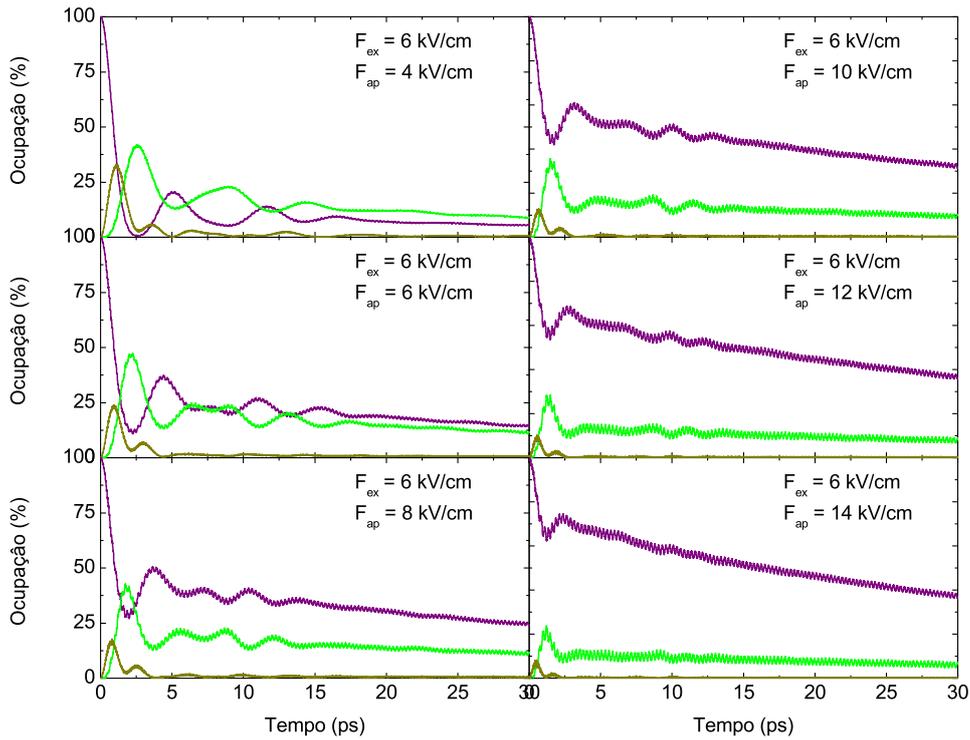


Figura 2.26: Ocupação para a componente de *spin down*, em função do tempo dos seguintes estados: estado fundamental do primeiro poço, (curva roxa), o estado quase-ligado (curva marrom) e o estado fundamental do segundo poço (curva verde). Os campos de excitação e aprisionamento foram sintonizados na configuração  $\Lambda$ . A intensidade do campo de excitação foi mantida constante em 6 kV/cm e a intensidade do campo de aprisionamento foi variada entre 4 - 14 kV/cm. O aumento da amplitude do campo de aprisionamento faz com que a ocupação do estado quase-ligado (curva marrom) diminui-se ao ponto de ser quase nula, por outro lado as ocupações do estado fundamental do primeiro poço (curva roxa) e o estado fundamental do segundo poço mantidas quase constantes, evidenciando a formação do estado escuro.

# Conclusão

Nesta dissertação foi realizada a modelagem computacional de duas heteroestruturas semicondutoras formadas por dois poços quânticos, um feito de uma liga semicondutora ( $GaAs$ ) e outro feito de um semicondutor magnético diluído (do inglês  $DMS$ ) ( $Ga_xMn_{1-x}As$ ), para possíveis aplicações em dispositivos de geração de fotocorrente polarizada em *spin*.

A geração da fotocorrente polarizada em *spin* foi obtida por meio da técnica de aprisionamento coerente de população (do inglês  $CTP$ ), de modo controlado, de uma determinada componente do *spin* do elétron. A  $CTP$  é modelada através do sistema de três níveis na formação  $Lambda$  ( $\Lambda$ ). Isto é, dois estados fundamentais cuja a transição óptica entre eles é proibida e um estado de maior energia que acopla os dois estados fundamentais por meio de dois lasers sintonizados na condição ressonante. Ou seja, o laser de excitação que acopla o primeiro estado fundamental com o estado de maior energia e o laser de aprisionamento que acopla do estado de maior energia com o segunda estado fundamental.

Esse sistema de três níveis na formação  $\Lambda$  foi obtido em uma heteroestrutura formada por dois poços quânticos separados entre si por uma larga barreira quântica. Cada poço quântico foi projetado para suportar apenas o estado fundamental. A barreira quântica evita o acoplamento entre os estados fundamentais. Foi escolhido um estado quase-ligado acima dos poços para fazer o acoplamento entre os estados fundamentais. A aplicação de campo magnético faz com que a profundidade do potencial gerado pelo segundo poço quântico dopado com impurezas magnéticas seja sensível a componente do *spin* do elétron. Com isso, a frequência de aprisionamento

do elétron no segundo poço quântico se torna dependente da orientação do seu *spin*. Portanto, foi criado um modo controlado para o aprisionamento de uma componente do *spin* do elétron, enquanto a outra componente está livre para gerar fotocorrente por meio da mudança da frequência do laser de aprisionamento. As frequências de excitação e aprisionamento foram determinadas através do cálculo do espectro de absorção.

O espectro de fotocorrente foi calculado considerando na dinâmica os dois campos oscilantes ligados e o estado inicial do elétron no poço quântico sem os dopantes magnéticos. No primeiro momento, foi estudado o efeito da amplitude de cada campo e foi observado que a geração da fotocorrente polarizada em *spin* está relacionada com a intensidade do campo de aprisionamento, quanto maior for a intensidade maior será o aprisionamento. O campo de excitação apenas ioniza o estado inicial, quando mais intenso ele for mais rápido será esse processo. Uma grande vantagem observada na polarização via efeito óptico é a velocidade que o processo ocorre, nas simulações foram na ordem de picosegundos. A assinatura do aprisionamento coerente de população na formação  $\Lambda$  é o aparecimento do estado escuro. O estado escuro foi observado no cálculo da projeção da função de onda evoluída no tempo em cada autoestado da configuração lambda ( $\Lambda$ ).

As heteroestruturas formadas pela junções de matérias semicondutores e semicondutores magnéticos diluídos mostraram grande potencial para o desenvolvimento de dispositivos para a spintrônica. A geração de fotocorrente polarizada em *spin* é um dos pré-requisitos no desenvolvimento dessa nova eletrônica. A geração de fotocorrente polarizada em *spin* foi obtida por meio da técnica de aprisionamento coerente de população de uma componente do *spin* do elétron via excitação óptica em sistemas realísticos de três níveis na formação  $\Lambda$ .

# Referências Bibliográficas

BD Agap'Ev and Gornyi. Coherent population trapping in quantum systems.

GAML Alzetta, A Gozzini, L Moi, and G Orriols. An experimental method for the observation of rf transitions and laser beat resonances in oriented na vapour. *Il Nuovo Cimento B (1971-1996)*, 36(1):5–20, 1976.

Remzi H Arpaci-Dusseau and Andrea C Arpaci-Dusseau. *Operating systems: Three easy pieces*. Arpaci-Dusseau Books, 2015.

Neil W Ashcroft, N David Mermin, and Sergio Rodriguez. Solid state physics, 1998.

David D Awschalom, Daniel Loss, and Nitin Samarth. *Semiconductor spintronics and quantum computation*. Springer Science & Business Media, 2013.

Gerald Bastard. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. 1990.

Anibal T Bezerra, Leonardo K Castelano, Marcos H Degani, Marcelo Z Maialle, Paulo F Farinas, and Nelson Studart. Generation and control of spin-polarized photocurrents in gamnas heterostructures. *Applied Physics Letters*, 104(2):022105, 2014.

K-J Boller, A Imamoglu, and Stephen E Harris. Observation of electromagnetically induced transparency. *Physical Review Letters*, 66(20):2593, 1991a.

K-J Boller, A Imamoglu, and Stephen E Harris. Observation of electromagnetically induced transparency. *Physical Review Letters*, 66(20):2593, 1991b.

Manuel Cardona and Y Yu Peter. *Fundamentals of semiconductors*. Springer, 2005.

- Fernando Casas, Ander Murua, and Mladen Nadinic. Efficient computation of the zassenhaus formula. *Computer Physics Communications*, 183(11):2386–2391, 2012.
- Saikat Chattopadhyay, Pratima Sen, Joshep Thomas Andrews, and Pranay Kumar Sen. Low temperature nano-spin filtering using a diluted magnetic semiconductor core–shell quantum dot. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 61:198–203, 2014.
- Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, Franck Laloë, and Bernd Crasemann. Quantum mechanics, 1998.
- John H Davies. *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*. Cambridge university press, 1997.
- Marcos H Degani and Marcelo Z Maialle. Numerical calculations of the quantum states in semiconductor nanostructures. *Journal of Computational and Theoretical Nanoscience*, 7(2):454–473, 2010.
- Marcos H Degani, Marcelo Z Maialle, Paulo F Farinas, Nelson Studart, Mauricio P Pires, and Patricia L Souza. Multiple-photon peak generation near the 10  $\mu\text{m}$  range in quantum dot infrared photodetectors. *Journal of Applied Physics*, 109(6):064510, 2011.
- Tomasz Dietl. A ten-year perspective on dilute magnetic semiconductors and oxides. *Nature materials*, 9(12):965–974, 2010.
- Raymond Dingle, William Wiegmann, and Charles H Henry. Quantum states of confined carriers in very thin  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ - $\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  heterostructures. *Physical Review Letters*, 33(14):827, 1974.
- Jerome Faist, Federico Capasso, Deborah L Sivco, Carlo Sirtori, Albert L Hutchinson, Alfred Y Cho, et al. Quantum cascade laser. *Science-AAAS-Weekly Paper Edition-including Guide to Scientific Information*, 264(5158):553–555, 1994.
- Zbigniew Ficek and Stuart Swain. *Quantum interference and coherence: theory and experiments*, volume 100. Springer Science & Business Media, 2005.

- Michael Fleischhauer, Atac Imamoglu, and Jonathan P Marangos. Electromagnetically induced transparency: Optics in coherent media. *Reviews of modern physics*, 77(2):633, 2005.
- Jacek K Furdyna. Diluted magnetic semiconductors. *Journal of Applied Physics*, 64(4):R29–R64, 1988.
- Jan A Gaj and Jacek Kossut. *Introduction to the Physics of Diluted Magnetic Semiconductors*, volume 144. Springer Science & Business Media, 2011.
- SD Ganichev, SA Tarasenko, VV Belikov, Peter Olbrich, Wolfgang Eder, DR Yakovlev, V Kolkovsky, W Zaleszczyk, G Karczewski, T Wojtowicz, et al. Spin currents in diluted magnetic semiconductors. *Physical review letters*, 102(15):156602, 2009.
- HR Gray, RM Whitley, and CR Stroud. Coherent trapping of atomic populations. *Optics letters*, 3(6):218–220, 1978.
- Chun Guan, Yunhui Xing, Chao Zhang, and Zhongshui Ma. Resonant electronic transport through a triple quantum-dot with  $\lambda$ -type level structure under dual radiation fields. *Journal of Applied Physics*, 116(6):063702, 2014.
- David W Kammler. *A first course in Fourier analysis*. Cambridge University Press, 2007.
- Joseph R Lakowicz and Barry R Masters. Principles of fluorescence spectroscopy. *Journal of Biomedical Optics*, 13(2):029901, 2008.
- HJ Lee, LY Juravel, JC Woolley, and AJ Spring Thorpe. Electron transport and band structure of  $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$  alloys. *Physical Review B*, 21(2):659, 1980.
- BF Levine, KK Choi, CG Bethea, J Walker, and RJ Malik. New 10  $\mu\text{m}$  infrared detector using intersubband absorption in resonant tunneling GaAs superlattices. *Applied Physics Letters*, 50(16):1092–1094, 1987.
- HC Liu and Federico Capasso. *Intersubband transitions in quantum wells: Physics and device applications*, volume 5. Academic press, 1999.

- Marcelo Z Maialle and Marcos H Degani. Coherent population trapping in intersub-band photocurrent spectra. *Physical Review B*, 83(15):155308, 2011.
- C Clay Marston and Gabriel G Balint-Kurti. The fourier grid hamiltonian method for bound state eigenvalues and eigenfunctions. *The Journal of Chemical Physics*, 91(6):3571–3576, 1989.
- Christoph Michel, SD Baranovskii, Peter Thomas, Wolfram Heimbrodt, Matthias T Elm, Peter J Klar, Bastian Goldlücke, Ulrich Wurstbauer, Matthias Reinwald, and Werner Wegscheider. Quantitative modeling of the annealing-induced changes of the magnetotransport in  $ga_{1-x}mn_x$  alloys. *Journal of Applied Physics*, 102(7):073712, 2007.
- H Ohno, H Munekata, T Penney, S Von Molnar, and LL Chang. Magnetotransport properties of p-type (in, mn) as diluted magnetic iii-v semiconductors. *Physical Review Letters*, 68(17):2664, 1992.
- H Ohno, N Akiba, F Matsukura, A Shen, K Ohtani, and Y Ohno. Spontaneous splitting of ferromagnetic (ga, mn) as valence band observed by resonant tunneling spectroscopy. *Applied physics letters*, 73(3):363–365, 1998.
- Jun John Sakurai and Eugene D Commins. Modern quantum mechanics, revised edition, 1995.
- Charles Santori, Philippe Tamarat, Philipp Neumann, Jörg Wrachtrup, David Fattal, Raymond G Beausoleil, James Rabeau, Paolo Olivero, Andrew D Greentree, Steven Praver, et al. Coherent population trapping of single spins in diamond under optical excitation. *Physical Review Letters*, 97(24):247401, 2006.
- Kazunori Sato, Lars Bergqvist, J Kudrnovský, Peter H Dederichs, Olle Eriksson, Ilja Turek, Biplab Sanyal, Georges Bouzerar, Hiroshi Katayama-Yoshida, VA Dinh, et al. First-principles theory of dilute magnetic semiconductors. *Reviews of modern physics*, 82(2):1633, 2010.
- Jaspri Singh. *Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures*. Cambridge University Press, 2007.

T Story, RR Galazka, Richard B Frankel, and PA Wolff. Carrier-concentration–induced ferromagnetism in pbsnmnte. *Physical Review Letters*, 56(7):777, 1986.

Zhiping Wang, Xuqiang Wu, Shenglai Zhen, Benli Yu, and Liang Lu. Efficient two-dimensional localization effect in a semiconductor quantum well. *Laser Physics*, 24(8):085201, 2014.

Igor Žutić, Jaroslav Fabian, and S Das Sarma. Spintronics: Fundamentals and applications. *Reviews of modern physics*, 76(2):323, 2004.

# Apêndice **A**

## O método *Split Operator*

Nesta apêndice será apresentado, em detalhes, o método numérico para a evolução temporal de um estado quântico, utilizado nessa dissertação [Degani and Maialle, 2010].

### A.1 Evolução da função de onda no domínio real

A evolução temporal no domínio real de um estado quântico é regida pela equação de Schrödinger

$$\frac{i}{\hbar} \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = \hat{H} \psi(x, t), \quad (\text{A.1})$$

sendo  $\hbar$  a constante reduzida de Planck,  $\psi(x, t)$  o vetor de estado do sistema e  $\hat{H}$  o operador hamiltoniano dado por

$$\hat{H} = \hat{T} + V(\hat{x}) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad (\text{A.2})$$

no qual  $\hat{P}$  é o operador *momentum* linear mecânico e  $V(\hat{x})$  o operador energia potencial.

A solução formal dessa equação diferencial parcial é dada por,

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} \hat{H} dt} \psi(x, t), \quad (\text{A.3})$$

o hamiltoniano não depende explicitamente do tempo, logo a evolução temporal será dada por

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} \Delta t} \psi(x, t), \quad (\text{A.4})$$

ou

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \left( \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{x}) \right) \Delta t} \psi(x, t), \quad (\text{A.5})$$

esta exponencial é o operador de evolução temporal cuja a geradora dessa translação na linha temporal é o operador hamiltoniano.

O método do *Split Operator* consiste na “quebra” do operador evolução numa multiplicação de exponenciais. Com operadores, não necessariamente, a exponencial da soma é a soma das exponenciais, apenas quando os operadores comutarem. Quando os operadores não comutam, eles seguem a formula de Zassenhaus [Casas et al., 2012]

$$e^{t(A+B)} = e^{tA} e^{tB} e^{-\frac{t^2}{2} [A,B]} e^{-\frac{t^3}{6} [A,[B,A]]} + \dots \quad (\text{A.6})$$

Os operadores *momentum* linear e potencial não comutam entre si, logo a quebra do operador evolução temporal não é exata mas uma aproximação. Considerando, em primeira aproximação, apenas os termos lineares

$$\psi(x, t + \Delta t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{P}^2}{2m} \Delta t} e^{-\frac{i}{\hbar} V(\hat{x}) \Delta t} \psi(x, t) + O(\Delta t^2). \quad (\text{A.7})$$

O erro dessa aproximação é da ordem  $(\Delta t^2)$ . Este erro pode ser menor se o hamiltoniano for dividido em mais termos. Por exemplo, se ele for dividido em 3 partes

$$\psi(x, t + \Delta t) \approx e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(\hat{x}) \Delta t}{2}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{\hat{P}^2 \Delta t}{2m}} e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(\hat{x}) \Delta t}{2}} \psi(x, t) + O(\Delta t^3), \quad (\text{A.8})$$

o erro agora é na ordem de  $(\Delta t^3)$ .

Quanto mais dividido for o hamiltoniano melhor será a aproximação, por outro lado o custo computacional para fazer essa operação será maior. Normalmente, o hamiltoniano é dividido em três partes. Nota-se, as exponenciais ainda são hermitianos

garantido assim a conservação de probabilidade e a boa estabilidade do método.

A evolução temporal de um estado  $t$  até  $t + \Delta t$  é obtida resolvendo a eq A.8. Para resolve-la numericamente é necessário discretizar o espaço e a função de onda numa grade de  $N$  pontos com espaçamento entre eles sendo constante ou não. Desta forma a função de onda será uma vetor coluna. Neste trabalho, utilizou uma grade uniforme.

O operador energia potencial é diagonal no espaço das posições, logo a multiplicação da sua exponencial é direta

$$\xi(x, t + \Delta t) = e^{\frac{-i V(x)\Delta t}{\hbar}} \psi(x, \Delta t). \quad (\text{A.9})$$

A próxima multiplicação exponencial envolve o operador energia cinética e o espaço da posição não é autofunção desse operador, logo a multiplicação não é uma operação direta como que foi para o operador energia potencial. A representação dele neste espaço é  $\hat{p}^2 = -\hbar \frac{d^2}{dx^2}$ . Um modo de resolver isso, é pela expansão da exponencial em série de Taylor de  $\Delta t$  como

$$e^{\kappa \Delta t} = 1 + \kappa \Delta t + \frac{(\kappa \Delta t)^2}{2} + \frac{(\kappa \Delta t)^3}{3!} + \dots$$

onde  $\kappa = i \frac{\hbar}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$ . A expansão pode ser reescrita na forma de

$$e^{\kappa \Delta t} = \left(1 + \frac{\kappa \Delta t}{2}\right) \left(1 + \frac{\kappa \Delta t}{2} + \frac{(\kappa \Delta t)^2}{4} + O(\Delta t^3)\right). \quad (\text{A.10})$$

A expansão foi realizada até que erro dela fosse da mesma ordem que o erro no *Split Operator*. O segundo termo pode ser escrito na forma de binômio de Newton

$$e^{\kappa \Delta t} = \left(1 + \frac{\kappa \Delta t}{2}\right) \left(1 - \frac{\kappa \Delta t}{2}\right)^{-1}. \quad (\text{A.11})$$

Portanto, a multiplicação da exponencial contendo a energia cinética se torna,

$$\eta(x, t + \Delta t) = e^{\frac{-i \hat{P}^2 \Delta t}{2m}} \xi(x, t + \Delta t),$$

$$\eta(x, t + \Delta t) = \left(1 + \frac{\kappa \Delta t}{2}\right) \left(1 - \frac{\kappa \Delta t}{2}\right)^{-1} \xi(x, t + \Delta t),$$

$$\left(1 - \frac{\kappa \Delta t}{2}\right) \eta(x, t + \Delta t) = \left(1 + \frac{\kappa \Delta t}{2}\right) \xi(x, t + \Delta t), \quad (\text{A.12})$$

ou na forma de

$$\left(1 - i \frac{\hbar \Delta t}{4m} \frac{d^2}{dx^2}\right) \eta(x, t + \Delta t) = \left(1 + i \frac{\hbar \Delta t}{4m} \frac{d^2}{dx^2}\right) \xi(x, t + \Delta t). \quad (\text{A.13})$$

Para resolver esta equação é necessário calcular as derivadas em cada ponto da grade. A segunda derivada em uma grade pode ser feita utilizando o método de diferenças finitas

$$f_i'' = \frac{f_{i-1} + f_{i+1} - 2f_i}{\delta^2}, \quad (\text{A.14})$$

no qual o índice  $i$  indica o ponto na grade,  $f_i$  o valor da função neste ponto e  $\delta$  a distância entre cada ponto da grade. Portanto,

$$\left(1 - i \frac{\hbar \Delta t}{4m} \frac{d^2}{dx^2}\right) \eta(x, t + \Delta t) = \eta_i - \beta (\eta_{i-1} - 2\eta_i + \eta_{i+1}) \quad (\text{A.15})$$

$$\left(1 + i \frac{\hbar \Delta t}{4m} \frac{d^2}{dx^2}\right) \xi(x, t + \Delta t) = \xi_i + \beta (\xi_{i-1} - 2\xi_i + \xi_{i+1}), \quad (\text{A.16})$$

onde,  $\beta = \frac{i\hbar}{4m\delta^2}$ , obtendo

$$-\beta \eta_{i-1} + \eta_i (1 + 2\beta) - \beta \eta_{i+1} = +\beta \xi_{i-1} + \xi_i (1 - 2\beta) + \beta \xi_{i+1}. \quad (\text{A.17})$$

Uma vez que é conhecido  $\xi$  em todos os pontos da grade  $N$  o lado direito da eq. A.17 é conhecido, tornando um vetor coluna  $\Theta_N$ . Por outro lado, o lado esquerdo é uma matriz, conhecida como matriz tridiagonal onde os elementos não nulos estão nas diagonais: principal, superior e inferior. Neste trabalho, foi utilizado condição de contorno para sistemas finitos, onde as funções de onda nas bordas são nulas  $\eta_0 = \eta_{n+1} = 0$ . Nestas condições, a representação matricial da eq. A.17 será

$$\begin{bmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \\ \xi_3 \\ \vdots \\ \xi_i \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1+2\beta & -\beta & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ -\beta & 1+2\beta & -\beta & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\beta & 1+2\beta & -\beta & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\beta & 1+2\beta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Theta_1 \\ \Theta_2 \\ \Theta_3 \\ \vdots \\ \Theta_i \end{bmatrix},$$

assim, o problema foi transformado na solução de um sistema de equações tridiagonal fornecendo os valores da  $\xi$  em cada ponto da grade.

Por outro lado, se há periodicidade no perfil de potencial é possível utilizar o algoritmo da *Fast Fourier Transform* (FFT) para calcular a exponencial do operador que contém a energia cinética, com isso é possível otimizar o tempo computacional.

O operador *momentum* linear é escrito através da relação de De Brogli,  $\hat{p} = \hbar\hat{k}$ , onde  $\hbar$  é a constante reduzida de Planck e  $\hat{k}$  o operador vetor de onda. O subespaço  $\{|k\rangle\}$  é autovetor do operador  $\hat{k}$  e diretamente o operador *momentum* linear também,

$$\hat{p}|k\rangle = \hbar k|k\rangle. \quad (\text{A.18})$$

A FFT é utilizada para transformar a função do onda do espaço das posições no espaço dos *momenta*

$$\xi(k, t + \Delta t) = FFT[\xi(x, t + \Delta t)]. \quad (\text{A.19})$$

Agora, a multiplicação da exponencial é direta

$$\eta(k, t + \Delta t) = e^{i\frac{(\hbar k)^2}{2m}\Delta t}\xi(k, t + \Delta t). \quad (\text{A.20})$$

A transformada inversa de Fourier volta à função de onda para o espaço das posições

$$\xi(x, t + \Delta t) = FFT^{-1}[\xi(k, t + \Delta t)]. \quad (\text{A.21})$$

Finalmente, a função evoluída é obtida multiplicando a exponencial da energia

potencial,

$$\psi(x, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{V(x)\Delta t}{2}} \xi(x, t + \Delta t). \quad (\text{A.22})$$

Repetindo esse processo,  $\Delta t$  após  $\Delta t$ , a função de onda inicial  $\psi(x, 0)$  será evoluída até um estado final  $\psi(x, t)$ . Este é o algoritmo do *Split-Operator*.

## A.2 Evolução da função de onda no domínio imaginário

Os autoestados do hamiltoniano podem ser encontrados utilizando o mesmo método descrito em A.1 mas, fazendo a evolução no tempo imaginário  $t = -i\tau$ . Neste domínio, a equação de Schrödinger A.4 torna-se uma equação tipo de difusão. O estado fundamental é obtido quando uma função de onda arbitrária é evoluída num intervalo de tempo bem longo, ou seja, a função arbitrária vai convergir para o autoestado fundamental quando o tempo for para o infinito. O operador evolução temporal,  $e^{-\hat{H}\Delta t/\hbar}$ , não é mais unitário sendo necessário realizar a normalização em cada intervalo de tempo [Degani and Maialle, 2010]

A prova que a evolução no tempo imaginário de uma função de onda arbitrária conduz o sistema para o seu estado fundamental é feita na seguinte maneira: Uma vez que os autoestados de um hamiltoniano formam uma base ortogonal completa,  $\{|\phi_n\rangle\}$ , qualquer função de onda pode ser escrita como combinação linear destes autoestados [Cohen-Tannoudji et al., 1998]

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{i\epsilon_n t/\hbar} |\phi_n\rangle, \quad (\text{A.23})$$

no qual  $a_n$  é um coeficiente complexo.

Fazendo a mudança para o tempo imaginário

$$|\psi(\tau)\rangle = \sum_n a_n e^{-\epsilon_n \tau/\hbar} |\phi_n\rangle. \quad (\text{A.24})$$

A evolução temporal da função de onda não é mais unitária, sendo necessário a

normalização em cada intervalo de tempo,

$$|\psi(\tau)\rangle^{norm} = \frac{\sum_n a_n e^{-\epsilon_n \tau / \hbar} |\phi_n\rangle}{\sqrt{\sum_n |a_n|^2 e^{-2\epsilon_n \tau / \hbar}}}. \quad (\text{A.25})$$

A eq A.25 pode ser reescrito separando o estado fundamental da somatória

$$|\psi(\tau)\rangle^{norm} = \frac{|\phi_0\rangle + \sum_{n=1} a_n e^{-\epsilon_n \tau / \hbar} |\phi_n\rangle}{\sqrt{1 + \sum_{n=1} \left| \frac{a_n}{a_0} \right|^2 e^{-2(\epsilon_0 - \epsilon_n) \tau / \hbar}}}. \quad (\text{A.26})$$

No limite de  $\tau$  muito grande a exponencial tende a zero pois  $\epsilon_0 > \epsilon_n$  logo o estado fundamental torna-se fortemente dominante em comparação aos outros termo. Portanto a função de onda converge para a autofunção do estado fundamental, ou seja,

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} |\psi(\tau)\rangle^{norm} = |\phi_0\rangle. \quad (\text{A.27})$$

A partir do estado fundamental é possível obter os demais autoestados do hamiltoniano, através do processo de ortonormalização de Gram-Schmidt. Neste caso, o estado fundamental é conhecido  $|\psi_0\rangle = |\phi_0\rangle$ . O primeiro estado excitado pode ser escrito como

$$|\phi_1\rangle = \sum_n b_n e^{\epsilon_n t / \hbar} |\phi_n\rangle \quad (\text{A.28})$$

A ortonormalização de Gram-Schmidt é escrita como

$$|\psi_1(\tau)\rangle = \frac{|\phi_1(\tau)\rangle - \langle\psi_0(\tau)|\phi_1(\tau)\rangle |\psi_0(\tau)\rangle}{\sqrt{\langle\phi_1(\tau)|\phi_1(\tau)\rangle - |\langle\psi_0(\tau)|\phi_1(\tau)\rangle|^2}} \quad (\text{A.29})$$

onde

$$\langle\phi_1|\phi_1\rangle = \sum_n |b_n|^2 e^{-2\epsilon_n \tau / \hbar}$$

$$\langle\psi_0|\phi_1\rangle = b_0 e^{-\epsilon_0 \tau / \hbar}$$

$$|\psi_1(\tau)\rangle = \frac{|\phi_1\rangle - \sum_{n>1} \frac{b_n}{b_1} e^{(\epsilon_1 - \epsilon_n)\tau/\hbar} |\phi_n\rangle}{\sqrt{1 + \sum_{i>1} \left| \frac{b_i}{b_1} \right|^2 e^{2(\epsilon_1 - \epsilon_i)\tau/\hbar}}}$$

Desde que  $\epsilon_0 < \epsilon_1 < \epsilon_2 < \dots < \epsilon_n$  no limite de  $\tau$  indo ao infinito

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} |\psi(\tau)\rangle^{norm} = |\phi_1\rangle. \quad (\text{A.30})$$

desta forma, o primeiro estado excitado foi encontrado. Este procedimento pode ser aplicado para os próximos estados excitados.

# O Método *Fourier Grid Hamiltonian* para autofunções e autoenergias para estados ligados

Neste apêndice será apresentado o método *Fourier Grid Hamiltonian* (FGH) para encontrar os autovetores e autovalores da equação de Schrödinger independente do tempo [Marston and Balint-Kurti, 1989].

## B.1 O método

O método consiste em escrever a equação de Schrödinger numa representação dual, das posições e dos *momenta*, onde cada operador do hamiltoniano é projetado na representação que é autovetor. A diagonalização da equação característica fornece seus respectivos autovetores e autovalores.

Os estados ligados de uma partícula submetida a um potencial unidimensional são determinados a partir da equação de Schrödinger independente do tempo

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \quad (\text{B.1})$$

Esta é uma equação de autovalores, onde  $\hat{H}$  o operador hamiltoniano dado pela soma dos operadores; energia cinética e energia potencial da partícula

$$\hat{H} = \hat{T} + V(\hat{x}) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad (\text{B.2})$$

$|\psi_n\rangle$  e  $E_n$  são os respectivos autovetores e autoenergias do hamiltoniano.

Estes autovetores pertencem ao espaço abstrato de Hilbert. Geralmente, na resolução dessa equação os autovetores são projetados no subespaço das posições mas, nem sempre essa base fornece o menor esforço no processo de diagonalização do hamiltoniano. Por exemplo, o operador energia potencial é melhor representado no espaço das posições, pois este espaço é autovetor dele. O mesmo não ocorre com o operador energia cinética que tem sua forma diagonal na base dos *momenta*. O *Método Fourier Grid Hamiltonian* utiliza esse concepção de escrever cada operador na base onde ele é autoestado.

Antes de apresentar o método, é necessário fazer algumas definições de base e a relação de autovalor. No subespaço das posições  $\{|x\rangle\}$ , ou representação de Schrödinger, o vetor base é escrito como  $|x\rangle$ . Sendo este, autovetor do operador posição  $\hat{x}$

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle. \quad (\text{B.3})$$

A relação de ortogonalidade e completeza dos vetores desta base são

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x) \quad (\text{B.4})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |x\rangle\langle x|dx = \mathbb{I}, \quad (\text{B.5})$$

onde  $\delta(x - x')$  delta de Dirac e  $\mathbb{I}$  a matriz identidade.

Considerando que o operador energia potencial depende apenas da posição,  $V(\hat{x})$ , sua representação na base das posições é obtida através das relações B.3 e B.4

$$\langle x'|V(\hat{x})|x\rangle = V(x)\delta(x' - x). \quad (\text{B.6})$$

O operador *momentum* linear é escrito através da relação de De Broglie,  $\hat{p} = \hbar\hat{k}$ , onde  $\hbar$  é a constante reduzida de Planck e  $\hat{k}$  o operador vetor de onda. O subespaço

$\{|k\rangle\}$  é autovetor do operador  $\hat{k}$  e diretamente do operador *momentum* linear também,

$$\hat{p}|k\rangle = \hbar k|k\rangle. \quad (\text{B.7})$$

Este subespaço segue as relações de completeza e ortogonalidade análogas ao subespaço  $\{|x\rangle\}$

$$\langle k'|k\rangle = \delta(k' - k) \quad (\text{B.8})$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |k\rangle\langle k| dk = \mathbb{I}. \quad (\text{B.9})$$

Portanto, o operador energia cinética na representação  $|k\rangle$  será

$$\begin{aligned} \langle k'|\hat{T}|k\rangle &= \langle k'|\frac{\hat{P}^2}{2m}|k\rangle \\ \langle k'|\hat{T}|k\rangle &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m}\delta(k' - k). \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

O subespaço  $|k\rangle$  é nada mais que a transformada de Fourier do subespaço  $|x\rangle$ . A matriz que faz a transformação entre essas representações é dada por

$$\langle k|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx}. \quad (\text{B.11})$$

Munido dessas definições, os autovetores e autovalores do halmiltoniano são encontrados na solução da equação de Schrödinger, B.1, projetada em  $|x'\rangle$

$$\langle x'|\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n\langle x'|\psi_n\rangle, \quad (\text{B.12})$$

onde  $\langle x'|\psi_n\rangle$  é a projeção do autovetor no subespaço das posições. Inserindo a relação de completeza entre o  $\hat{H}$  e o autovetor,

$$\langle x'|\hat{H} \int dx|x\rangle\langle x|\psi_n\rangle = E_n\langle x'|\psi_n\rangle$$

$$\int dx \langle x' | \hat{H} | x \rangle \psi_n(x) = E_n \psi_n(x')$$

Que pode ser resumida na forma de

$$\int dx \left[ \langle x' | \hat{H} | x \rangle - E_n \delta(x' - x) \right] \psi_n(x) = 0. \quad (\text{B.13})$$

Este sistema de equações apenas tem solução, não trivial, se e somente se a equação característica,

$$\det \left[ \langle x' | \hat{H} | x \rangle - E_n \delta(x' - x) \right] = 0 \quad (\text{B.14})$$

for satisfeita. Portanto, para cada autoenergia existe um autovetor associado a ela que satisfaz essa condição. Resta agora calcular os elementos de matriz  $\hat{H}$  no subespaço das posições. O espaço das posições não é autovetor do operador hamiltoniano, apenas do operador energia potencial. Assim, cada termo de  $\hat{H}$  será projetado na base em que é autovetor,

$$\langle x' | \hat{H} | x \rangle = \langle x' | \hat{T} | x \rangle + V(x) \delta(x' - x) \quad (\text{B.15})$$

$$\langle x' | \hat{H} | x \rangle = \langle x' | \hat{T} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} |k\rangle \langle k| dk \right\} | x \rangle + V(x) \delta(x' - x)$$

$$\langle x' | \hat{H} | x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \langle k | x \rangle T_k \langle x' | k \rangle dk + V(x) \delta(x' - x)$$

$$\langle x | \hat{H} | x' \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ik(x-x')} T_k dk + V(x) \delta(x' - x). \quad (\text{B.16})$$

Esta equação é o cerne do método, resta agora diagonalizar a matriz e encontrar seus respectivos autovalores e autovetores. Na próxima seção será discutida como implementar numericamente este método.

## B.2 Implementação numérica do método

O primeiro passo a ser feito para a implementação deste método é a discretização do subespaço das posições em uma grade de tamanho  $x_i$  com espaçamento entre os pontos constante,  $\Delta x$ , ou seja

$$x_i = i\Delta x, \quad (\text{B.17})$$

sendo  $i$  o número de pontos na grade.

Se  $N$  é o número total de pontos, o tamanho da grade será  $N\Delta x$ . A partir desse comprimento é possível fazer a construção da grade no subespaço  $k$ , pois a partir dele é determinado o maior comprimento de onda e a menor frequência neste subespaço,

$$\begin{aligned} \Delta k &= 2\pi/\lambda_{max}, \\ \Delta k &= 2\pi/N\Delta x. \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

Os pontos da grade são distribuídos em torno do ponto  $k = 0$ , logo o tamanho da grade precisa ser simétrica em relação a este ponto. Portanto, o número de pontos nesta grade é escrito como

$$2n = (N - 1) \quad (\text{B.19})$$

onde  $N$  é o número de pontos, ímpar, da grade no subespaço das posições e  $n$  o número de pontos na grade em relação ao ponto  $k = 0$ .

As relações de completeza e ortogonalidade na forma discreta são escritas como,

$$\sum_{i=1}^N \Delta x |x_i\rangle \langle x_i|, \quad (\text{B.20})$$

$$\Delta x |x_j\rangle \langle x_i| = \delta_{ij} \quad (\text{B.21})$$

A forma discreta dos elementos de matriz do hamiltoniano B.16 é escrito como

$$H_{ij} = \langle x_i | \hat{H} | x_j \rangle \quad (\text{B.22})$$

$$\begin{aligned}
H_{ij} &= \frac{1}{2\pi} \sum_{l=-n}^{l=n} e^{il\Delta k(x_i-x_j)} \left\{ \frac{\hbar^2}{2m}(l\Delta k)^2 \right\} \Delta k + \frac{V(x_i)\delta_{ij}}{\Delta x} \\
H_{ij} &= \frac{1}{2\pi} \frac{2\pi}{N\Delta x} \sum_{l=-n}^n \exp \{il(2\pi/N\Delta x)(i-j)\Delta x\} T_l + \frac{V(x_i)\delta_{ij}}{\Delta x} \\
H_{ij} &= \frac{1}{\Delta x} \left\{ \sum_{l=-n}^n \frac{e^{il2\pi(i-j)/N}}{N} \cdot T_l + V(x_i)\delta_{ij} \right\}, \tag{B.23}
\end{aligned}$$

onde

$$T_l = \frac{\hbar^2}{2m}(l\Delta k)^2 = \frac{2}{m} \left( \frac{\hbar\pi l}{N\Delta x} \right)^2 \tag{B.24}$$

Estes elementos da matriz podem ser escritos numa forma mais compacta utilizando a formula de Euler do cosseno

$$\cos(\phi) = \frac{e^{i\phi} + e^{-i\phi}}{2}$$

Como  $T_0 = 0$ , o hamiltoniano reduz à

$$H_{ij} = \frac{1}{\Delta x} \left\{ \frac{2}{N} \sum_{l=1}^n \cos(l2\pi(i-j)/N) T_l + V x_i \delta_{ij} \right\}. \tag{B.25}$$

Os autovetores e autovalores serão determinados através da solução da equação característica B.14 na forma discreta

$$\det \left[ H_{ij} - \frac{E_n \delta_{ij}}{\Delta x} \right] = 0. \tag{B.26}$$

Os autovetores precisam ser normalizados. Este é o método de FGH para encontrar os autovalores e autovetores de estados ligados.

## Observáveis físicos

Neste apêndice será apresentado, de modo completo, os observáveis físicos de interesse para o trabalho, que são: autoenergia, espectro de absorção, fotocorrente e ocupação.

### C.1 Autoenergia

As autoenergias da heteroestrutura foram calculadas por meio de dois métodos distintos. O primeiro, consiste o calculo do valor esperado do hamiltoniano na sua autobase. O segundo método é baseado no calculo do *Power Spectrum* de uma função de onda que seja uma combinação linear de todos os autoestados da heteroestrutura, neste método não é preciso conhecer de antemão os autoestados.

#### C.1.1 Valor esperado do hamiltoniano

Com os autoestados determinados  $|\phi_n\rangle$ , a autoenergia é o valor esperado do hamiltoniano da heteroestrutura,

$$E_n = \langle \phi_n | \hat{H} | \phi_n \rangle. \quad (\text{C.1})$$

Ou na forma explicita

$$E_n = \frac{-\hbar^2}{2m^*} \langle \phi_n | \frac{d^2}{dx^2} | \phi_n \rangle + \langle \phi_n | V(x) | \phi_n \rangle. \quad (\text{C.2})$$

Como os autoestados foram discretizados numa grade, o valor esperado e a derivada precisam ser escritos na forma discreta também, sendo assim

$$E = \frac{\hbar^2}{2m^* \Delta x^2} \sum_j^n \phi_j^\dagger \cdot (\phi_{j-1} + \phi_{j+1} - 2\phi_j) + \sum_j \phi_j^\dagger V_j \phi_j. \quad (\text{C.3})$$

Sendo  $\phi_j^\dagger$  o complexo conjugado do autoestado e  $\Delta x$  o espaçamento entre os pontos da grade.

### C.1.2 Power spectrum

Uma segunda forma de obter as autoenergias da heteroestrutura é através do cálculo do *Power Spectrum*. Em análise de Fourier, o *Power Spectrum* fornece informação sobre quais frequências angulares existem em uma função oscilante dependente do tempo [Kammler, 2007]. Ele é definido como a transformada de Fourier da correlação temporal da função de onda evoluída no tempo com a sua função de onda estacionária [Degani et al., 2011]

$$P(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \psi(t) | \psi(0) \rangle. \quad (\text{C.4})$$

A função de onda pode ser escrita como uma combinação linear da base de autoestados do Hamiltoniano  $\hat{H}$   $\{|\phi_n\rangle\}$  [Cohen-Tannoudji et al., 1998]. A função de onda é expandida nesta base como

$$|\psi(0)\rangle = \sum_n a_n |\phi_n\rangle, \quad (\text{C.5})$$

sendo  $a_n$  um número complexo. A evolução temporal desse estado é dada por

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n e^{i\epsilon_n t/\hbar} |\phi_n\rangle. \quad (\text{C.6})$$

Portanto o *power spectrum* é escrito na forma

$$P(\omega) \equiv 2\pi \sum_n |a_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega - \epsilon_n/\hbar)t}. \quad (\text{C.7})$$

A integral do lado esquerdo é proporcional a função delta de Dirac centrada na

frequência de cada autoenergia do hamiltoniano,

$$P(\omega) \equiv \sum_n |a_n|^2 \delta(\omega - \epsilon_n/\hbar) \quad (\text{C.8})$$

ou seja, o gráfico de *power spectrum* será um conjunto de picos de intensidade nas frequências angulares das autoenergias, bastando apenas multiplica-las por  $\hbar$  para obter as autoenergias. Neste trabalho, a função de onda não é projetada na base, esse artifício foi utilizado apenas para a demonstração do *power spectrum*.

## C.2 Espectro de absorção

O espectro de absorção fornece informação dos comprimentos de onda que são absorvidos pela heteroestrutura, quando ela é irradiada por uma onda policromática. Sendo uma fonte rica de informações sobre as propriedades eletrônica da heteroestrutura. A absorção acontece mais provável quando a energia da radiação incidente corresponde à energia entre dois autoestados do sistema [Lakowicz and Masters, 2008]. Neste trabalho, dois métodos distintos foram utilizados para o cálculo do espectro de absorção: a absorção via regra de ouro de Fermi [Cardona and Peter, 2005] e absorção via método dinâmico [Degani et al., 2011].

### C.2.1 Regra de ouro de Fermi

O processo de absorção ocorre quando há o acoplamento entre elétrons e fótons. A interação entre elétron e fóton será descrita por uma aproximação semi-clássica, onde o campo eletromagnético é tratado classicamente enquanto o elétron é descrito por mecânica quântica.

O hamiltoniano de uma partícula carregada,  $-q$ , em um campo eletromagnético é

$$\hat{H} = \frac{(\hat{P} + q\hat{A})^2}{2m^*} + V(\hat{z}), \quad (\text{C.9})$$

sendo  $\hat{p}$  o *momentum* conjugado do elétron,  $q$  a carga,  $m^*$  a massa efetiva,  $\hat{A}$  o potencial vetor do campo eletromagnético e  $V(\hat{z})$  o potencial da heteroestrutura.

Os operadores *momentum* e potencial vetor não comutam entre si. A equação C.9 pode ser escrito como

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m^*} + \frac{q}{2m^*} \hat{A} \cdot \hat{p} + \frac{q}{2m^*} \hat{p} \cdot \hat{A} + \frac{q^2 A^2}{2m^*}. \quad (\text{C.10})$$

Neste problema é adotado o *gauge de Coloumb* onde  $\nabla \cdot A = 0$  e  $\phi = 0$ . O operador *momentum*, na representação das posições, é proporcional a derivada em função da posição, logo o terceiro termo do hamiltoniano é nulo. O termo quadrático do potencial vetor é relacionado à absorção não-linear, processo de multifoton, em primeiro momento apenas absorção linear será tratado. Com essas suposições, o hamiltoniano é reduzido a

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \frac{q}{m^*} \hat{A} \cdot \hat{p}. \quad (\text{C.11})$$

onde  $\hat{H}_0$  é o hamiltoniano da heteroestrutura na ausência do campo eletromagnético e o segundo termo é o hamiltoniano de interação radiação-elétron. Assumindo que o segundo termo é menor em comparação com o primeiro, logo o segundo termo pode ser tratado como uma perturbação dependente do tempo.

A regra de ouro de Fermi fornece a probabilidade de transição entre um estado inicial  $|\phi_i\rangle$  e o estado final  $|\phi_f\rangle$  por unidade de tempo sob influência de um perturbação externa dependente do tempo, dado por

$$\alpha(E) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \phi_i | \hat{H}_{er} | \phi_f \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - E). \quad (\text{C.12})$$

sendo  $\hat{H}_{er}$  o hamiltoniano da interação elétron-radiação. A função delta de Dirac diz que a transição ocorre quando a energia da radiação incidente é igual a diferença de energia entre dois autoestados. Resta agora, o calculo do elemento de matriz da perturbação na base do sistema não perturbado. No *gauge de Coloumb* o potencial vetor é escrito como [Sakurai and Commins, 1995]

$$\vec{A} = \vec{A}_0 \cos(\vec{k} \cdot \vec{r} - \omega t), \quad (\text{C.13})$$

ou

$$\vec{A} = \frac{\vec{A}_0}{2} \left[ e^{+i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} - e^{-i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \right] \quad (\text{C.14})$$

onde o  $\vec{A}_0$  a polarização da função de onda. O primeiro termo corresponde o processo de absorção, quando o elétron no estado inicial absorve um fóton de energia e transita para o autoestado excitado e o segundo termo é o processo inverso quando o elétron no autoestado excitado emite um fóton de energia e decai para o autoestado fundamental esse fenômeno é conhecido como emissão estimulada. O segundo termo é sempre nulo devido a conservação de energia na delta de Dirac na equação C.12. O elemento de matriz se torna

$$|\langle \phi_i | \hat{H}_{er} | \phi_f \rangle|^2 = \frac{q^2}{4m^{*2}} |\langle \phi_i | \vec{A}_0 e^{+i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)} \cdot \hat{p} | \phi_f \rangle|^2. \quad (\text{C.15})$$

Considerando a aproximação de dipolo, que é válida quando o comprimento de onda da onda incidente é muito maior que qualquer dimensão característica da estrutura, que em transição intersubbanda é a largura do poço quântico. Assim a exponencial pode ser aproximada à unidade. Portanto,

$$|\langle \phi_i | \hat{H}_{er} | \phi_f \rangle|^2 = \frac{q^2}{4m^{*2}} |\langle \phi_i | \vec{A}_0 \cdot \hat{p} | \phi_f \rangle|^2. \quad (\text{C.16})$$

Considerando que a polarização da onda incidente é na direção de crescimento da heteroestrutura, eixo  $\hat{z}$ , o operador *momentum* é projetado nessa direção, portanto

$$|\langle \phi_i | \hat{H}_{er} | \phi_f \rangle|^2 = \frac{q^2}{4m^{*2}} |\langle \phi_i | \hat{p}_z | \phi_f \rangle|^2. \quad (\text{C.17})$$

Neste caso, o operador *momentum* pode ser reescrito através da identidade [Sakurai and Commins, 1995]

$$\hat{p}_z = \frac{m^*}{i\hbar} \left[ \hat{H}, \hat{z} \right], \quad (\text{C.18})$$

Sendo  $\hat{H}$  o hamiltoniano da heteroestrutura. A equação C.17 se torna

$$|\langle \phi_i | \hat{H}_{er} | \phi_f \rangle|^2 = \frac{q^2}{4m^{*2}} \frac{m^{*2}}{\hbar^2} |\langle \phi_i | \left[ \hat{H}, \hat{z} \right] | \phi_f \rangle|^2 \quad (\text{C.19})$$

$$|\langle \phi_i | \hat{H}_{er} | \phi_f \rangle|^2 = \frac{q^2}{4m^{*2}} \frac{m^{*2}}{\hbar^2} (E_f - E_i) |\langle \phi_i | \hat{z} | \phi_f \rangle|^2 \quad (\text{C.20})$$

Finalmente, o coeficiente de absorção, equação C.12, em uma transição intersub-banda é escrito como

$$\alpha(E) = \frac{\pi q^2}{4m^* \hbar} \left( \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_f - E_i) |\langle \phi_i | \hat{z} | \phi_f \rangle|^2 \right) \delta(E_f - E_i - E) \quad (\text{C.21})$$

O termo em parênteses é conhecido como força de oscilador, uma grandeza que mede quão forte é a transição entre estados por meio de um campo oscilante

$$f_{fi} = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_f - E_i) |\langle \phi_i | \hat{z} | \phi_f \rangle|^2. \quad (\text{C.22})$$

Na implementação numérica, o espectro de absorção é calculado a partir dos autoestados e autoenergias da heteroestrutura. A delta de Dirac pode ser aproximada por uma Lorentziana [Sakurai and Commins, 1995]

$$\delta(E_f - E_i - E) = \lim_{\Gamma \rightarrow 0} \left( \frac{\Gamma}{2\pi} \right) \frac{1}{(E - (E_f - E_i))^2 + \Gamma^2/4} \quad (\text{C.23})$$

onde  $\Gamma$  é a largura da Lorentziana. O espectro de absorção entre o estado inicial e todos os estados excitados da heteroestrutura será

$$\alpha_n(E) = \sum_n \frac{1}{2\pi} \frac{f_{ni} \Gamma}{(E - (E_n - E_i))^2 + \Gamma^2/4} \quad (\text{C.24})$$

### C.2.2 Método dinâmico

Neste método a absorção é calculada através da correlação temporal do momento de dipolo médio entre o autoestado e a função de onda evoluída no tempo

$$\alpha(u.a) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \langle \phi_n | e^{i\hat{H}t/\hbar} (-ez) | \psi(t) \rangle, \quad (\text{C.25})$$

sendo  $z$  a posição na grade,  $|\phi_n\rangle$  o autoestado referência e  $|\psi(t)\rangle$  a função de onda que seja uma combinação linear de todos os autoestados do sistema. Essa função de onda é obtida da seguinte maneira: é aplicado um campo elétrico estático no sistema

e é encontrado o estado fundamental, este autoestado é uma combinação linear de todos os autoestados.

Para demonstração desse método, a função de onda foi expandida na base do sistema conforme a equação C.5 e o elétron se encontra no estado fundamental. O Espectro de absorção sera

$$\alpha(u.a) \equiv \sum_n a_n \langle 0 | -ez | \phi_n \rangle \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i(\omega - (\epsilon_0 - \epsilon_n/\hbar))t}, \quad (\text{C.26})$$

O elemento de matriz é conhecido como força de oscilador que mede quão forte é o acoplamento entre o estado  $|0\rangle$  e o estado  $|\phi_n\rangle$  por meio de um campo elétrico oscilante ao longo da direção  $\hat{z}$ . A integral é facilmente reconhecida como proporcional a delta de Dirac, ou seja,

$$\alpha(u.a) \equiv \sum_n 2\pi a_n \langle 0 | -ez | \phi_n \rangle \delta(\omega - (\epsilon_0 - \epsilon_n/\hbar)). \quad (\text{C.27})$$

Assim, o coeficiente de absorção fornece quanto de energia é necessária para a transição elétron no estado fundamental para um estado excitado arbitrário.

## C.3 Ocupação

O nível de ocupação de um dado estado em relação ao tempo  $t$  é definido como a projeção do autoestado inicial na função de onda estado evoluído (MAIALLE, 2011)

$$\rho_n(t) = \left| \int_0^T \phi_n^*(z) \psi(z, t) dz \right|^2 \quad (\text{C.28})$$

Esta grandeza é utilizada para verificar se há a transição entre estados quando um campo oscilante é introduzido na dinâmica.

## C.4 Fotocorrente

A fotocorrente total gerada pelo elétron excitado do estado fundamental por meio do campo excitante é dado por

$$I(\hbar\omega) = \frac{e}{T} \int_0^T [J_{direita}(\hbar\omega, t) - J_{esquerda}(\hbar\omega, t)] dt \quad (C.29)$$

sendo  $e$  a carga do elétron,  $T$  o tempo de integração,  $\hbar\omega$  a energia do campo de excitação e  $J(\hbar\omega, t)$  a densidade de corrente gerada à direita ou à esquerda. A densidade de corrente é obtida através, da versão quântica, da equação de continuidade

$$\nabla \cdot J = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (C.30)$$

$$\rho = |\psi|^2 \quad (C.31)$$

$$J(\hbar\omega, t) = -\frac{i\hbar}{2m} [\psi^\dagger \nabla \psi - \psi \nabla \psi^\dagger] \quad (C.32)$$

onde,  $\rho$  é densidade de probabilidade e  $J(r, t)$  a corrente de densidade da partícula. A equação de continuidade descreve o transporte de uma quantidade conservada, que neste caso é a densidade de probabilidade, ou seja a partícula não é destruída. A equação C.30 é válida apenas quando o potencial é real.

A versão unidimensional da densidade de corrente é

$$J_c(\hbar\omega, t) = \text{Real} \left[ \frac{\hbar}{im} \psi^\dagger(z, t) \frac{d\psi(z, t)}{dx} \right] \Big|_{z=\pm z_c} \cdot \quad (C.33)$$

em que  $\pm z_c$  é o ponto na grade fora da região dos poços, onde a corrente é calculada.