

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

ANIBAL THIAGO BEZERRA

Modelagem computacional de estruturas de poços quânticos semicondutores para dispositivos
optoeletrônicos e spintrônicos

São Carlos

2014

ANIBAL THIAGO BEZERRA

Modelagem computacional de estruturas de poços quânticos semicondutores para dispositivos optoeletrônicos e spintrônicos

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Departamento de Física, Centro de Ciências Exatas e de Tecnologia da Universidade Federal de São Carlos,

Orientador: Prof. Dr. Nelson Studart

São Carlos

2014

**Ficha catalográfica elaborada pelo DePT da
Biblioteca Comunitária/UFSCar**

B574mc

Bezerra, Anibal Thiago.

Modelagem computacional de estruturas de poços quânticos semicondutores para dispositivos optoeletrônicos e spintrônicos / Anibal Thiago Bezerra. -- São Carlos : UFSCar, 2014.

78 f.

Tese (Doutorado) -- Universidade Federal de São Carlos, 2014.

1. Semicondutores. 2. Spintrônica. 3. Poços quânticos. 4. Semicondutores magnéticos diluídos. 5. Fotocorrente. I. Título.

CDD: 537.622 (20^a)

Aníbal Thiago Bezerra

Tese de doutorado submetida à
Coordenação do Programa de Pós-
Graduação em Física, da
Universidade Federal de São
Carlos, como requisito parcial para
a obtenção do título de doutor em
ciências.

Aprovado em: 29 de janeiro de 2013

BANCA EXAMINADORA

N. Studart

Prof. Dr. Nelson Studart (Orientador)
Universidade Federal de São Carlos - DF

Gilmar Eugenio Marques

Prof. Dr. Gilmar Eugenio Marques
Universidade Federal de São Carlos - DF

M. Degani

Prof. Dr. Marcos Henrique Degani
Universidade Estadual de Campinas - FCA

Caio Lewenkopf

Prof. Dr. Caio Lewenkopf
Universidade Federal Fluminense

Caetano R. Miranda

Prof. Dr. Caetano Rodrigo Miranda
Universidade de Federal do ABC

Dedico esse trabalho à minha esposa Natália e à minha filha Beatriz, pelo amor incondicional que sempre me ofereceram, sem elas nada disso teria sido possível.

Agradecimentos

Gostaria agradecer àqueles que muito me ajudaram durante a realização desse trabalho.

Primeiramente a Deus, agradeço por minha vida e por sempre iluminar meus caminhos.

Em especial agradeço à minha esposa Natália e à minha filha Beatriz, pelos maravilhosos momentos vividos, pelas muitas alegrias, companheirismo e por todo o amor dedicado durante todos esses anos. Amo-as profundamente!

Agradeço à minha família, meus pais Vicente e Aparecida por sempre me indicarem os melhores caminhos e por me ajudarem a traçá-los.

Ao meu irmão Edgard, à minha cunhada Flávia e à minha afilhada Alice que está chegando.

Às minhas cunhadas Juliana e Ana Paula, meu cunhado Fábio e à minha querida sobrinha Maria Laura. Agradeço também ao meu sogro e sogra Durval e Neuza.

Agradeço ao meu orientador e amigo professor Nelson Studart, primeiramente pela oportunidade de realização desse trabalho e por muitas vezes ter me ajudado em tudo o que precisei e continuar me ajudando, com quem aprendi muito, tanto do ponto de vista pessoal quanto profissional.

Agradeço também aos professores Paulo Farinas e Leonardo Castelano da UFSCar e aos professores Marcos Degani e Marcelo Maialle da FCA-UNICAMP, que me deram a direção e o suporte necessário para a realização desse e, sem dúvida, me darão nos próximos trabalhos que estão por vir.

Agradeço ao pessoal do Departamento de Física: Daniel, Marcio, Mariama, Zini, Cabral, Everton, Rafael, pelas conversas e risadas.

Agradeço aos amigos de sempre Paulo, Flavia e minha afilhada Aninha, Jorge, Savana e Adriano. Pessoal, valeu!

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pela bolsa concedida (Edital MCT/CNPq nº 70/2009) e ao DISSE - Instituto Nacional de Ciência e Tecnologia em Nanodispositivos Semicondutores pelo apoio à pesquisa desenvolvida.

We've come too far to give up who we are...

Get Luck – Daft Punk

Resumo

Na presente tese, realizamos a modelagem computacional de estruturas semicondutoras baseadas em poços quânticos múltiplos com barreiras de filtro e em poços quânticos com camadas de material semicondutor magnético diluído. Para tanto, resolvemos numericamente a equação de Schrödinger dependente do tempo na aproximação de massa efetiva, por meio da evolução temporal das funções de onda do sistema, utilizando o chamado método do *Split-Operator*. Com as funções de onda evoluídas no tempo temos acesso às variáveis dinâmicas do sistema, como os acoplamentos entre os estados pela presença de luz, descrita na forma de um campo elétrico oscilante. Determinamos assim as probabilidades de absorção, forças de oscilador das transições intersubbandas geradas por essa excitação com luz, as probabilidades de transmissão através da estrutura e, em especial, o espectro de fotocorrente proveniente desses sistemas semicondutores. As autofunções e as autoenergias dos estados estacionários dos sistemas são obtidas pelo mesmo método realizando a evolução em tempo imaginário.

No primeiro trabalho, a fotocorrente da estrutura de poços quânticos múltiplos com barreiras de filtro foi analisada em função do campo elétrico aplicado à estrutura. Foi encontrada uma dependência da fotocorrente com o campo elétrico bastante interessante, na forma de uma fotocondutância negativa controlada pelo campo elétrico aplicado à heteroestrutura. Atribuímos essa condutância negativa à interação entre estados localizados e estendidos no contínuo se manifestando na forma de *anticrossings* e o aumento da fotocorrente para os valores de campo elétrico nos quais ocorrem esses *crossings* foi associado a transições de dois níveis do tipo Landau-Zener-Stückelberg-Majorana.

No segundo trabalho, foi calculada a fotocorrente polarizada em spin de estruturas de poços quânticos de GaMnAs, na presença de um campo elétrico variável e um campo magnético de poucos teslas. O estudo mostrou a existência de domínios espectrais na região de THz do espectro eletromagnético, para os quais as estruturas propostas são altamente seletivas em spin. Para tais frequências, encontramos que a fotocorrente é polarizada em spin e a aplicação do campo elétrico é capaz de reverter forma muito eficiente o sinal da polarização. O

comportamento observado sugere a possibilidade de mecanismos simples de controle sobre a fotocorrente e a Física por trás de tais efeitos foi entendida em termos dos acoplamentos dependentes de spin dos estados da estrutura, emergentes do perfil de potencial particular das heteroestruturas.

Apresentamos dois trabalhos adicionais diretamente relacionados aos trabalhos principais. No primeiro trabalho, calculamos a corrente de escuro proveniente da estrutura de poços quânticos múltiplos com e sem barreiras de filtro, adicionando de forma integral a probabilidade de transmissão através da estrutura no modelo de Levine que determina essa corrente. Observamos que a presença das barreiras de filtro diminui significativamente a corrente de escuro dessa estrutura no regime de altos valores de campo elétrico. No segundo trabalho adicional, foi calculada a fotocorrente de uma estrutura de PQ com camada DMS, composta por ZnMnSe. Observamos a possibilidade de controle da polarização de spin com o campo elétrico, assim como no caso da estrutura composta de GaMnAs.

Palavras-Chave: Poços quânticos múltiplos; semicondutores magnéticos diluídos; fotocorrente; método do *Split Operator*; dispositivos semicondutores.

Abstract

In the present thesis, we realize a computational modeling of semiconductor structures based on multiple quantum wells with filter barriers and on quantum wells with semiconductor diluted magnetic layers. We numerically solve the time-dependent Schrödinger's equation within the effective mass approximation, using the Split Operator method. Through the time evolved wave functions we access the dynamics quantities as the light assisted couplings of the states, in which the light is described by the inclusion of an oscillating electric field in the Hamiltonian. Then we determine the probabilities of absorption, oscillator strengths of the intersubband transitions induced by the light. Moreover we analyze the transmission probabilities and, in special, the system's photocurrent. The eigenstates and the eigenfunctions of the stationary states are also obtained within the method by simply making an imaginary time evolution.

In the first work, the photocurrent of a multiple quantum well structure with filter barriers modulating the continuum above the wells was analyzed as a function of the applied bias. We find out an interesting dependence of the photocurrent with the applied field, as a differential negative photoconductance controlled by the field. We attribute this negative conductance to the interaction between the localized and extended states in the continuum, expressed by anticrossings between these states and the enhancement of the photocurrent at the crossings by the Landau-Zener-Stückelberg-Majorana like transitions.

In the second work, it was evaluated the spin polarized photocurrent arising from quantum well's structures of GaMnAs, under light, electric and magnetic fields of few teslas. The study shows the existence of spectral domains in the THz ranges for which the proposed structure is strongly spin selective. For such photon frequencies, the photocurrent is spin polarized and the application of the external electric field reverts the polarization's signal. This behavior suggests the possibility of conveniently simple switching mechanisms. The physics underlying these results is studied and understood in terms of the spin-dependent coupling strengths emerging from the particular potential profiles of the heterostructures.

We present two additional works related to the main ones. In the first additional one, we evaluated the dark current of the multiple quantum well structure with and without filter barriers. For doing this, we add totally the transmission probability through the structure in the Levine's model for the dark current. We observe that dark current is considerably reduced for the structure with the filter barriers when compared to the structure without these barriers. In the second additional work, we calculate the photocurrent in a ZnMnSe structure. We observe the generation of a spin polarized photocurrent controlled by the external electric field, as in the case of the GaMnAs structures.

Keywords: Multiple quantum well; dilute magnetic semiconductor; photocurrent; Split-Operator method; semiconductor devices.

ÍNDICE DE ILUSTRAÇÕES

- FIGURA 1 - PROCESSOS DE TRANSIÇÃO ÓPTICA EM SEMICONDUTORES. (A) TRANSIÇÃO INTERBANDAS EM MATERIAL TRIDIMENSIONAL (*BULK*), NA QUAL O PORTADOR DE CARGA É EXCITADO DA BANDA DE VALÊNCIA PARA A BANDA DE CONDUÇÃO. (B) TRANSIÇÃO INTERBANDAS EM MATERIAL BIDIMENSIONAL, NESSE CASO O PORTADOR PROVENIENTE DE UM ESTADO LOCALIZADO NA BANDA DE VALÊNCIA DO POÇO QUÂNTICO É EXCITADO PARA UM ESTADO LOCALIZADO NA BANDA DE CONDUÇÃO. (C) TRANSIÇÃO INTERSUBBANDAS EM UM MATERIAL BIDIMENSIONAL NA QUAL O ELÉTRON (BURACO) É EXCITADO DE UM ESTADO MENOS ENERGÉTICO NA BANDA DE CONDUÇÃO (VALÊNCIA) PARA UM ESTADO MAIS ENERGÉTICO NA MESMA BANDA, OU PARA UM ESTADO NA REGIÃO DO CONTÍNUO DE ENERGIAS ACIMA DAS BARREIRAS (ESQUEMATIZADO PELAS LINHAS PONTILHADAS ACIMA DOS POÇOS). 7
- FIGURA 2 – PERFIL DE POTENCIAL DA HETEROESTRUTURA DE POÇOS QUÂNTICOS MÚLTIPLOS. A LINHA VERMELHA MOSTRA A ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DOS POÇOS, OS QUAIS TÊM QUASE A MESMA ENERGIA NA AUSÊNCIA DE CAMPO ELÉTRICO APLICADO. A REGIÃO AZUL REPRESENTA O QUASE-CONTÍNUO DE ESTADOS FORMADO NA REGIÃO DAS BARREIRAS DE FILTRO. 21
- FIGURA 3 – (A) DETALHE DO PERFIL DE POTENCIAL NA REGIÃO DAS BARREIRAS DE FILTRO, ATRAVÉS DA QUAL A (B) PROBABILIDADE DE TRANSMISSÃO FOI CALCULADA. PODEMOS NOTAR A FORMAÇÃO DE MINIBANDAS NA REGIÃO DO CONTÍNUO, ONDE A PROBABILIDADE DE TRANSMISSÃO É TOTAL, O QUE É DEVIDO À SIMETRIA DA ESTRUTURA NA AUSÊNCIA DE CAMPO ELÉTRICO. ... 23
- FIGURA 4 – DETALHE DA ESTRUTURA MOSTRANDO O MÓDULO QUADRADO DAS AUTOFUNÇÕES QUE FORMAM A PRIMEIRA MINIBANDA, PARA $F_s = 1 \text{ kV cm}^{-1}$ 24
- FIGURA 5 – FOTOCORRENTE SEM CAMPO ELÉTRICO APLICADO À ESTRUTURA, MOSTRANDO AS COMPONENTES CALCULADAS DO LADO ESQUERDO (CURVA TRACEJADA VERMELHA) E DO LADO DIREITO DA ESTRUTURA (CURVA PONTILHADA PRETA). A CORRENTE TOTAL PROVENIENTE DA SOMA DAS COMPONENTES (CURVA CHEIA AZUL), O QUAL É NULA DEVIDO À SIMETRIA DA ESTRUTURA, É TAMBÉM APRESENTADA. 25
- FIGURA 6 – PERFIL DE POTENCIAL DA ESTRUTURA DE POÇOS QUÂNTICOS MÚLTIPLOS NA PRESENÇA DE CAMPO ELÉTRICO $F_s = 5 \text{ kV cm}^{-1}$. SÃO MOSTRADOS OS AUTOESTADOS DOS POÇOS QUÂNTICOS, OS QUAIS SÃO LOCALIZADOS FORMANDO A CHAMADA *STARK LADDER*, CUJA SEPARAÇÃO TOTAL ENTRE OS ESTADOS LOCALIZADOS NOS POÇOS DOS EXTREMOS $\Delta Et = 10 eFs d = 80 \text{ meV}$ 27
- FIGURA 7 - ESPECTRO DE FOTOCORRENTE PARA DIFERENTES CAMPOS ELÉTRICOS APLICADOS À ESTRUTURA DE PQM. TEMOS QUE AS REGIÕES DAS CURVAS EM QUE A FOTOCORRENTE É CONSTANTE (LINHAS HORIZONTAIS) REPRESENTAM AS LINHAS DE BASE PARA O EIXO VERTICAL ONDE A CORRENTE É NULA. SENDO ASSIM, PODEMOS NOTAR QUE PARA BAIXOS VALORES DE CAMPO ELÉTRICO, ALGUNS VALORES DE CORRENTE SÃO NEGATIVOS. 28
- FIGURA 8 – ESPECTROS DE FOTOCORRENTE DOS PQ MOSTRADOS INDIVIDUALMENTE, COMO FUNÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO VARIANDO DE 1 A 46 kV cm^{-1} . OS PAINÉIS (A) AO (J) SÃO RELACIONADOS À FOTOCORRENTE DO 1° PQ E AO 10° PQ, RESPECTIVAMENTE. AS CURVAS FORAM DESLOCADAS VERTICALMENTE PARA PERMITIR UMA MELHOR VISUALIZAÇÃO. AS REGIÕES DAS CURVAS EM QUE

A FOTOCORRENTE É CONSTANTE (LINHAS HORIZONTAIS) REPRESENTAM AS LINHAS DE BASE PARA O EIXO VERTICAL ONDE A CORRENTE É NULA. 29

FIGURA 9 – ESPECTROS DE TRANSMISSÃO PARA VÁRIOS VALORES DE CAMPO ELÉTRICO. PARA OBTEN UMA COMPARAÇÃO DIRETA COM OS ESPECTROS DE FOTOCORRENTE, FOI SOMADA A ENERGIA DO ESTADO FUNDAMENTAL DO (A) 1^oPQ E DO (B) 2^o PQ. AS SETAS SÃO GUIAS PARA OS OLHOS DAS POSIÇÕES DOS PICOS DE TRANSMISSÃO, CUJO COMPORTAMENTO É MUITO SEMELHANTE AO DOS PICOS NAS CURVAS DE FOTOCORRENTE DAS FIGURA 8(A) E (B). 30

FIGURA 10 – OUTRA VISUALIZAÇÃO DOS ESPECTROS DE FOTOCORRENTE MOSTRADOS NA FIGURA 8. 31

FIGURA 11 – (A) ESPECTRO DE ENERGIA EM FUNÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO. (B) AMPLIAÇÃO DA REGIÃO DESTACADA NO ESPECTRO DE ENERGIA, MOSTRANDO OS *ANTICROSSINGS* NOS NÍVEIS. OS TAMANHOS DOS PONTOS SÃO PROPORCIONAIS AO *PARTICIPATION RATIO*, SIGNIFICANDO QUE QUANTO MAIOR O PONTO MAIS O ESTADO É ESTENDIDO. (C) O MESMO QUE EM (B) COM OS PONTOS SENDO PROPORCIONAIS À FORÇA DE OSCILADOR. 35

FIGURA 12 – ESPECTROS DE FOTOCORRENTE PARA VÁRIOS VALORES DE CAMPO ELÉTRICO, USANDO O FATOR DE BOLTZMANN PARA SIMULAR EFEITOS DE TEMPERATURA PARA (A) 4 K E (B) 77 K. 36

FIGURA 13 – PERFIL DE POTENCIAL DA ESTRUTURA DE PQ SIMPLES (PQS) PARA (A) A COMPONENTE DE SPIN ↓ E PARA (C) A COMPONENTE DE SPIN ↑, PARA UM CAMPO ELÉTRICO ESTÁTICO DE $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. (B) ESPECTRO DE ABSORÇÃO PARA O SPIN ↓ (LINHA PRETA CHEIA) E PARA O SPIN ↑ (LINHA VERMELHA PONTILHADA). (D) O MESMO QUE (A) PARA $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$. (E) O MESMO QUE (B) PARA $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$. O MESMO QUE (C) PARA $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$. AS CURVAS PRETAS E VERMELHAS E VERDES NOS PAINÉIS (A), (C), (D) E (F) APRESENTAM O MÓDULO QUADRADO DAS FUNÇÕES DE ONDA DO SISTEMA. 40

FIGURA 14 – PERFIL DE POTENCIAL DA ESTRUTURA DE PQ COM DUAS CAMADAS (PQD) PARA (A) A COMPONENTE DE SPIN ↓ E PARA (C) A COMPONENTE DE SPIN ↑, SEM CAMPO ELÉTRICO ESTÁTICO. (B) ESPECTRO DE ABSORÇÃO PARA O SPIN ↓ (LINHA PRETA CHEIA) E PARA O SPIN ↑ (LINHA VERMELHA PONTILHADA). (D) O MESMO QUE (A) PARA $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. (E) O MESMO QUE (B) PARA $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. O MESMO QUE (C) PARA $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. AS CURVAS PRETAS E VERMELHAS E VERDES NOS PAINÉIS (A), (C), (D) E (F) APRESENTAM O MÓDULO QUADRADO DAS FUNÇÕES DE ONDA DO SISTEMA. O *INSET* NO PAINEL (E) APRESENTA A FORÇA DE OSCILADOR DA TRANSIÇÃO ENTRE O ESTADO FUNDAMENTAL DA COMPONENTE SPIN ↑ E O QUINTO ESTADO. 41

FIGURA 15 – DIAGRAMA ESQUEMÁTICO DA OCUPAÇÃO DE SPIN. A REGIÃO EM AZUL (EM VERMELHO) REPRESENTA A OCUPAÇÃO DA COMPONENTE SPIN ↓ (↑). ΔE É A DIFERENÇA DE ENERGIA ENTRE OS ESTADOS FUNDAMENTAIS DAS COMPONENTES DE SPIN E E_F É A ENERGIA DE FERMI. 45

FIGURA 16 – FOTOCORRENTE DA ESTRUTURA PQS PARA AS COMPONENTES DE SPIN ↓ (LINHA PRETA CHEIA) E ↑ (LINHA VERMELHA PONTILHADA), PARA UMA ENERGIA DE FERMI DE $E_F = 25 \text{ meV}$ PARA (A) $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$ E PARA (C) $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$. (B) O MESMO QUE (A) PARA $E_F = 40 \text{ meV}$. (D) O MESMO QUE (B) PARA $E_F = 40 \text{ meV}$ 47

- FIGURA 17 – FOTOCORRENTE SPIN \downarrow (CURVA PRETA SÓLIDA) E SPIN \uparrow (CURVA VERMELHA PONTILHADA) (A) SEM CAMPO ELÉTRICO APLICADO E PARA (B) $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. O *INSET* MOSTRA A DIFERENÇA ENTRE AS INTENSIDADES DOS PICOS DE FOTOCORRENTE PARA AS COMPONENTES DE SPIN \downarrow E SPIN \uparrow , EM FUNÇÃO DO CAMPO ELÉTRICO APLICADO À ESTRUTURA. 50
- FIGURA 18 - ESQUEMA DE DISCRETIZAÇÃO DO SISTEMA PARA A RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE SCHRÖDINGER USANDO AS CONDIÇÕES DE CONTORNO. ESTÃO REPRESENTADAS AS ONDAS INCIDENTE, REFLETIDA E TRANSMITIDA NO POTENCIAL..... 74
- FIGURA 19 - MODELO DE DIMINUIÇÃO DA ENERGIA DE ATIVAÇÃO ELETRÔNICA. A LINHA PRETA REPRESENTA UMA BARREIRA COULOMBIANA SEM A PRESENÇA DE CAMPO ELÉTRICO. A LINHA AZUL REPRESENTA O PERFIL DE POTENCIAL NA PRESENÇA DE CAMPO ELÉTRICO. A LINHA VERMELHA É PROPORCIONAL AO CAMPO APLICADO (EFEITO STARK). 78
- FIGURA 20 – PROBABILIDADE DE TRANSMISSÃO PARA PARTES DA ESTRUTURA DE PQM. A CURVA PRETA SÓLIDA APRESENTA A TRANSMISSÃO PARA APENAS UMA BARREIRA SIMPLES, ESQUEMATIZANDO O PERFIL DE POTENCIAL “VISTO” POR UM ELÉTRON CONFINADO NO PRIMEIRO POÇO QUÂNTICO. DA MESMA FORMA, A CURVA VERMELHA PONTILHADA APRESENTA A TRANSMISSÃO PARA UMA DUPLA BARREIRA ESQUEMATIZANDO O POTENCIAL “VISTO” POR UM ELÉTRON NO SEGUNDO PQ. 81
- FIGURA 21 – RESULTADOS DE CORRENTE DE ESCURO PARA UMA ESTRUTURA DE POÇOS QUÂNTICOS MÚLTIPLOS (SCHNEIDER, *ET AL.*, 2007). A CURVA ROXA COM PONTOS ABERTOS MOSTRA OS RESULTADOS EXPERIMENTAIS, A CURVA VERMELHA MOSTRA OS RESULTADOS OBTIDOS PELO MODELO DE LEVINE PARA $TE, F = 1$ E A CURVA MARROM MOSTRA OS RESULTADOS OBTIDOS PELO MODELO DE LEVINE LEVANDO EM CONSIDERAÇÃO A TRANSMISSÃO. 82
- FIGURA 22 – CORRENTE DE ESCURO PARA A ESTRUTURA DE PMQ COM (CURVA AZUL) E SEM (CURVA CINZA) AS BARREIRAS DE FILTRO. 83
- FIGURA 23 – PERFIL DE POTENCIAL DA ESTRUTURA DE ZnMnSe PARA A COMPONENTE DE SPIN \downarrow PARA (A) $F_s = 3 \text{ kV cm}^{-1}$ E (C) $F_s = 5 \text{ kV cm}^{-1}$. (B), (D) O MESMO QUE (A), (C), RESPECTIVAMENTE, PARA A COMPONENTE DE SPIN \uparrow . PARA ESSA ESTRUTURA, A CAMADA DMS SE ENCONTRA DO LADO DIREITO DA ESTRUTURA..... 84
- FIGURA 24 – FOTOCORRENTE DA ESTRUTURA DE ZnMnSe PARA (A) $F_s = 3 \text{ kV cm}^{-1}$ E (B) $F_s = 7 \text{ kV cm}^{-1}$ 86

Sumário

1. Introdução	1
2. Introdução à Física de poços quânticos para dispositivos optoeletrônicos e spintrônicos	5
2.1. Transições intersubbandas.....	5
2.2. Fotodetectores de Infravermelho.....	11
2.3. Spintrônica	13
3. O método do <i>Split Operator</i> na solução da equação de Schrödinger.....	15
4. Fotocondutância negativa em poços quânticos múltiplos com barreira de filtro na presença de campo elétrico.....	18
4.1. Design da estrutura.....	19
4.2. Resultados e Discussão	20
4.3. Conclusões	34
5. Geração e controle de fotocorrente polarizada em spin em heteroestruturas de GaMnAs.....	35
5.1. Design das estruturas.....	36
5.2. Resultados e Discussão	39
5.2.1. Poço quântico simples (PQS).....	39
5.2.2. Poço quântico com duas camadas (PQD).....	43
5.3. Conclusões	46
6. Conclusões Gerais.....	48
REFERÊNCIAS.....	50
APÊNDICE A	55
Método do <i>Split Operator</i>	55
a. Autofunções	59
b. Autoenergias	61
APÊNDICE B	63
B.1. Fotocorrente	63
B.2. Absorção óptica.....	65
B.3. Espectros de transmissão eletrônica	67
APÊNDICE C	70

C.1.	Corrente de escuro.....	70
C.2.	Fotocorrente polarizada em spin para estruturas de ZnMnSe	76

1. Introdução

Poços quânticos (PQ) semicondutores são heteroestruturas constituídas de camadas finas de material semicondutor com as quais podemos observar e controlar efeitos de caráter quântico. Muitas de suas propriedades são provenientes do confinamento quântico dos portadores de carga (elétrons e buracos) na camada que forma o poço, crescida entre barreiras de potencial formadas por camadas de outros semicondutores com *band gap* maior (DINGLE *et al.*, 1974). Uma das principais vantagens na utilização dessas estruturas é que elas podem ser concebidas com um elevado grau de precisão, por meio de modernas técnicas de crescimento epitaxial.

Outra vantagem é que muitos dos efeitos físicos das estruturas de poços quânticos são vistos em temperatura ambiente e são explorados em dispositivos reais, empregados em sistemas cotidianos como os lasers de diodo utilizados em leitores de DVD, entre outros. Do ponto de vista científico, eles também são um interessante "laboratório" em que podemos explorar vários efeitos quânticos, os quais não poderiam ser facilmente investigados. Por exemplo, podemos trabalhar com os chamados *éxcitons*, que surgem da interação eletrônica entre portadores de carga, podendo ser confinados no PQ e submetidos a campos externos elétricos e magnéticos (GALETI *et al.*, 2013). Podemos também cuidadosamente entender o comportamento de poços quânticos acoplados na presença de luz, estudando processos de aprisionamento de elétrons em um dos PQ, remetendo a processos de transparência eletromagnética induzida (MAIALLE *et al.*, 2011). Os poços quânticos também podem ser utilizados de forma bastante eficiente para modelar estruturas mais complexas como fios e pontos quânticos, aproveitando as simetrias desses sistemas (GOLOVACH *et al.*, 2006; NOWAK *et al.*, 2012).

Com o contínuo avanço tecnológico nos processos de crescimento e caracterização de heteroestruturas semicondutoras, o estudo das propriedades físicas relativas aos PQ se mantém ativo nos últimos anos, sendo renovado a cada nova aplicação. Alguns exemplos de aplicações de PQ em dispositivos optoeletrônicos que demandam grande atenção da comunidade científica são os *Quantum Cascade Lasers* (GMACHL *et al.*, 1998; FAIST *et al.*, 1996) e os fotodetectores de infravermelho baseados em transições intersubbandas de PQ (LEVINE, 1993; DEGANI *et al.*, 2011). Além disso, o avanço computacional tem possibilitado novos tipos de modelo para o transporte eletrônico e para transições ópticas lineares e não lineares, como a absorção múltipla de fótons em PQ (DEGANI *et al.*, 2010).

Dessa forma, os PQ constituem o foco principal do presente trabalho, cujo objetivo é realizar a modelagem computacional de sistemas semicondutores baseados em estruturas de

poços quânticos múltiplos com barreiras de filtro e estruturas de poços quânticos contendo camadas de material semiconductor magnético diluído (*Diluted Magnetic Semiconductor*, - DMS na sigla em inglês), para possíveis aplicações em dispositivos optoeletrônicos e spintrônicos. Para tanto, realizamos um estudo teórico sistemático da influência do campo elétrico externo aplicado em tais estruturas. Por meio desse estudo, buscamos entender propriedades importantes para a compreensão da Física de dispositivos semicondutores e essenciais para o desenvolvimento de novos dispositivos. Dentre tais propriedades, estão a probabilidade de transmissão através da estrutura e a fotocorrente obtida pela interação entre o elétron e um campo elétrico oscilante na forma de um pulso, que tem o papel de simular a excitação com luz. Devido às pequenas separações em energia entre as subbandas nas estruturas propostas, essa luz tem frequências que pertencem à região infravermelha do espectro eletromagnético. Além disso, estudamos também a absorção óptica que fornece informações adicionais sobre a resposta da fotocorrente associada aos estados eletrônicos das estruturas. Para isso, resolvemos numericamente pelo método *Split Operator* a equação de Schrödinger na aproximação de massa efetiva, obtendo os estados quânticos do sistema evoluídos no tempo. O método permite calcular diretamente os estados estacionários na presença de campos externos, tratados sem aproximações. A partir dos estados estacionários determinamos o espectro de energia do sistema.

Apresentamos nessa tese os resultados de dois estudos teóricos originais envolvendo transporte e transições ópticas intersubbandas que geram fotocorrente em heteroestruturas semicondutoras com poços quânticos, formados por compostos de arseneto de gálio (GaAs) dopados com alumínio (Al) e manganês (Mn), na presença de campo elétrico e campo magnético aplicados perpendicularmente às camadas da estrutura e na presença de luz.

No primeiro estudo, analisamos a fotocorrente proveniente da excitação óptica de elétrons localizados nos estados fundamentais dos PQ acoplados a um quase-contínuo de estados excitados modulados pela presença de barreiras de potencial que simulam filtros. Observamos uma série de ressonâncias nas curvas de fotocorrente *versus* energia dos fótons incidentes, as quais foram entendidas em termos das contribuições individuais de cada um dos poços quânticos. Verificamos a presença de um pico principal pouco sensível ao campo elétrico, associado à transição intersubbanda entre estados localizados e estendidos na região das barreiras de filtro para um mesmo poço. Além disso, observamos também picos bastante sensíveis ao campo elétrico aplicado, associados às transições entre estados localizados nos PQ e estados de contínuo de poços adjacentes. Também foi observada para campos elétricos pequenos, a geração de fotocorrente reversa, contra o campo elétrico (SIRTORI *et al.*, 1993). Como principal resultado, apontamos o surgimento de uma fotocondutância negativa,

controlada pelo campo elétrico aplicado à heteroestrutura. Atribuímos essa condutância negativa à interação entre estados localizados e estendidos na região das barreiras de filtro. A interação se manifesta na forma de *anticrossings* entre tais estados e o aumento da fotocorrente nesses *crossings* é associado a transições adiabáticas do tipo Landau-Zener-Stückelberg-Majorana (LANDAU, 1932; ZENER, 1932; STUECKELBERG; MAJORANA, 1932), induzidas dinamicamente na região dos *anticrossings* (RIBEIRO *et al.*, 2013). Tais transições adiabáticas entre os estados que participam do *anticrossing* ocorrem ao variarmos no tempo o campo externo responsável pela geração do *crossing*, ou seja, variando o campo que determina o acoplamento entre tais estados geramos uma probabilidade de transição entre eles (SHEVCHENKO *et al.*, 2010). Nesse caso, as propriedades físicas desses estados são trocadas entre si (ROSAM *et al.*, 2001; HINO *et al.*, 2005), como é o caso da localização e as forças de oscilador.

No segundo estudo, analisamos a geração de fotocorrente polarizada em spin, controlada pelo campo elétrico externo e pela luz, para os sistemas de poços quânticos com camadas de material DMS. Na presença de um campo magnético externo, na camada DMS, temos o surgimento de um potencial efetivo dependente de spin, a partir do qual propomos dois designs especiais gerando assimetrias entre as componentes de spin. No primeiro design, o PQ é inteiramente formado pelo DMS, já no segundo design o PQ é formado por uma camada não magnética e por uma camada DMS. Conseguimos com essas estruturas o controle dependente de spin da localização do estado final das transições ópticas responsáveis pela geração de fotocorrente. Além disso, obtivemos o controle das forças de oscilador dessas transições ópticas e o controle das probabilidades de absorção óptica por meio do campo elétrico aplicado. Dessa maneira, alcançamos o controle da polarização de spin da fotocorrente por meio desse campo.

A organização da tese é como segue. Na seção 2 apresentamos os ingredientes básicos da Física de fotodetectores baseados em PQ, enfatizando o papel das transições intersubbandas, bem como aspectos gerais dos fotodetectores de infravermelho e da spintrônica relevantes para os trabalhos desenvolvidos nessa tese. O objetivo dessa seção é permitir ao leitor estabelecer uma relação entre os dois trabalhos realizados, já que se tratam de estruturas compostas por poços quânticos acoplados a um quase-contínuo de estados sujeitos à excitação óptica. Para tais estruturas o processo utilizado para a geração de corrente são as *transições intersubbandas* entre estados localizados nos poços quânticos e estados do espectro quase-contínuo de energias acima das barreiras nessas estruturas. E, como estamos considerando transições entre estados de uma mesma banda cuja separação entre si é de poucos mili-electron volts (meV), uma conexão imediata que pode ser diretamente inferida

está relacionada a uma possível aplicação de tais estruturas como dispositivos optoeletrônicos, mais especificamente como fotodetectores de infravermelho. No caso do segundo estudo sobre as estruturas de PQ com camadas de material DMS, podemos ir além e aproveitar a geração de fotocorrente polarizada em spin para propor dispositivos spintrônicos.

Na subseção 2.1., descrevemos o processo de transições intersubbandas, por meio de um modelo de interação luz-matéria que determina transições ópticas em heteroestruturas usando a aproximação de funções envelope (BASTARD, 1991; HELM, 2000). Na subseção 2.2., apresentamos alguns aspectos gerais relacionados aos fotodetectores de infravermelho baseados em poços quânticos, os QWIP (*Quantum Well Infrared Photodetector*). Na subseção 2.3., destacamos alguns pontos principais sobre o desenvolvimento da spintrônica, principalmente relacionados a propostas de design de novas heteroestruturas contendo camadas de material DMS, com o objetivo de contribuir para a fabricação de novos dispositivos spintrônicos.

Na seção 3, apresentamos a parte essencial do método numérico utilizado na solução da equação de Schrödinger: o método do *Split Operator*. Os detalhes dos métodos podem ser encontrados no Apêndice A. Através do método do *Split-Operator*, pode-se calcular as propriedades do estado fundamental e dos estados excitados, como suas energias e seus acoplamentos (DEGANI *et al.*, 2010) e, a partir destes dados, as grandezas físicas relevantes como a fotocorrente e a absorção óptica do sistema sobre a influência de campos externos, podem ser obtidas de maneira direta sem a necessidade de expansões em base ou mesmo aproximações para pequenos campos. As expressões matemáticas dessas grandezas são deduzidas no Apêndice B. Para o cálculo da transmissão eletrônica, optamos por usar o método em que a equação de Schrödinger independente do tempo é resolvida por meio da utilização de ondas incidentes, transmitidas e refletidas pelo potencial, empregando a continuidade das funções de onda e de suas derivadas nas bordas do potencial. Os detalhes são apresentados no Apêndice B.

Na seção 4, apresentamos os resultados correspondentes ao primeiro trabalho original da tese, relacionado à estrutura de PQ múltiplos com barreiras de filtro. Já na seção 5, apresentamos os resultados referentes ao segundo estudo das estruturas de PQ com camadas de material DMS.

Na seção 6, resumimos os principais resultados obtidos na presente tese.

E, por razões de completeza, apresentamos no Apêndice C dois outros resultados não publicados, relacionados aos trabalhos apresentados nessa tese, em que a corrente de escuro para a estrutura de poços quânticos múltiplos é calculada e a fotocorrente polarizada em spin obtida para estruturas de DMS da família II-VI (ZnMnSe).

2. Introdução à Física de poços quânticos para dispositivos optoeletrônicos e spintrônicos

Nesta seção abordamos tópicos básicos das propriedades de poços quânticos necessários para uma melhor compreensão dos trabalhos desenvolvidos nessa tese.

2.1. Transições intersubbandas

As transições intersubbandas, estão relacionadas às transições ópticas entre estados eletrônicos quase-localizados em semicondutores provenientes do confinamento quântico, também conhecidos como subbandas (HELM, 2000). O avanço das técnicas de crescimento epitaxial, como a epitaxia por feixes moleculares (do inglês: *molecular beam epitaxy* - MBE), possibilitou o desenvolvimento de estruturas de baixa dimensionalidade (poços quânticos, fios quânticos, pontos quânticos e até mesmo os anéis quânticos) que dão origem a sistemas artificiais a partir dos quais é possível realizar uma *engenharia de estados eletrônicos*. Esse tipo de conceito tem sido muito difundido no campo da Física de semicondutores a partir da década de 1970, quando surgiram as primeiras propostas experimentais que demonstraram a evidência de estados quantizados em poços quânticos semicondutores (DINGLE *et al.*, 1974). A partir daí, muitas outras propostas surgiram utilizando as transições intersubbandas para, por exemplo, o desenvolvimento de dispositivos como é o caso dos fotodetectores de infravermelho (LEVINE *et al.*, 1987; LIU *et al.*, 1992; SCHNEIDER *et al.*, 2007; DEGANI *et al.*, 2011).

A Figura 1 mostra alguns processos de excitação óptica em semicondutores. No painel (a), temos a excitação interbandas em um material tridimensional sem confinamento, também conhecido como *bulk*. Notamos que ao aplicar luz no semicondutor os elétrons são excitados através do *band gap* do material deixando estados vagos na banda de valência (buracos) e preenchendo estados vazios na banda de condução. Dependendo da largura do *band gap*, a excitação pode também ocorrer por meio de processos térmicos, também conhecidos como excitação termiônica (ETTEH *et al.*, 2002; LIU *et al.*, 1992; CASTELLANO *et al.*, 2009).

Os poços quânticos podem ser considerados a estrutura quântica mais simples de ser utilizada nessa engenharia de estados eletrônicos. Eles surgem basicamente a partir do crescimento de uma fina camada de material semicondutor (da ordem do comprimento de onda de de Broglie do elétron, cerca de 100 Å) entre camadas de outro semicondutor de *band*

gap maior, como mostram as Figura 1(b) e (c). Sendo assim, dependendo da diferença relativa entre os *band gaps* dos materiais que formam o PQ (o chamado *band offset*), os portadores de carga podem ser confinados na direção de crescimento da heteroestrutura semicondutora. Esse confinamento gera níveis de energia que são quantizados na direção do confinamento quântico, dando origem às subbandas. A quantização é muito similar ao caso dos estados quantizados de um poço quântico infinito, cuja energia é dada por

$$E_n^{PQ} = E_{\parallel} + \frac{\hbar^2 \pi^2 n^2}{2mL^2} \quad \text{Eq. 1}$$

onde E_{\parallel} é a energia dos elétrons no plano paralelo à direção de crescimento que, por não possuir confinamento, podem ser descritos por ondas planas. \hbar é a constante de Planck reduzida, m é a massa desse elétron e L é a largura do poço. Como podemos notar, o espectro de energia é quantizado, com $n = 1, 2, 3, \dots$. Ao aplicarmos uma perturbação externa, os elétrons podem ser excitados entre subbandas de bandas diferentes (transição interbandas) como esquematiza a Figura 1(b), ou entre estados de uma mesma banda (transição intersubbandas) cujo processo é mostrado na Figura 1(c).

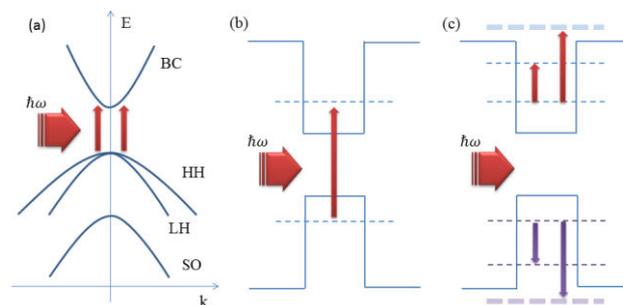


Figura 1 - Processos de transição óptica em semicondutores. (a) Transição interbandas em material tridimensional (*bulk*), na qual o portador de carga é excitado da banda de valência para a banda de condução. (b) Transição interbandas em material bidimensional, nesse caso o portador proveniente de um estado localizado na banda de valência do poço quântico é excitado para um estado localizado na banda de condução. (c) Transição intersubbandas em um material bidimensional na qual o elétron (buraco) é excitado de um estado menos energético na banda de condução (valência) para um estado mais energético na mesma banda, ou para um estado na região do contínuo de energias acima das barreiras (esquematizado pelas linhas pontilhadas acima dos poços).

Ao tratarmos de transições intersubbandas via a aplicação de luz, a energia do fóton incidente sobre a estrutura necessária para realizar a excitação é determinada pela separação energética entre as subbandas. Tal separação é determinada basicamente pela profundidade e pela largura do poço, parâmetros esses que podem ser ajustados durante o processo de fabricação da heteroestrutura. Esse fator estrutural somado aos *band offset* dos materiais comumente utilizados na construção de dispositivos, determina a excitação por fótons com

energias variando desde 6 até cerca de 600 meV, ou seja, na região do infravermelho do espectro eletromagnético, região essa muito importante do ponto de vista tecnológico (HELM, 2000).

Sendo assim, é importante entendermos como funciona o processo de excitação óptica em poços quânticos semicondutores, determinando o coeficiente de absorção óptica de uma transição intersubbanda. Para essas heteroestruturas, tal coeficiente pode ser obtido através do elemento de matriz de dipolo elétrico entre estados do sistema, descritos por meio de funções envelope (BASTARD, 1991). Nessa descrição, a função de onda, na aproximação de massa efetiva para uma banda, pode ser escrita como o produto da parte periódica das funções de Bloch $u_\nu(\vec{r})$, com a periodicidade da rede cristalina do semicondutor, com funções envelope $f_i(\vec{r})$ que variam lentamente sobre um período da rede. Esse modelo descreve o movimento eletrônico na subbanda i e depende do formato do poço quântico ou até mesmo de potenciais efetivos gerados pela presença de campos elétricos e magnéticos externos. Assim a função de onda que descreve o elétron nessa estrutura pode ser separada como

$$\psi_i(\vec{r}) = f_i(\vec{r})u_\nu(\vec{r}), \quad \text{Eq. 2}$$

onde o índice ν denota uma banda no centro da zona de Brillouin.

Podemos considerar que as funções de Bloch são as mesmas para toda a estrutura, de forma que a equação de Schrödinger independente do tempo pode ser considerada apenas para a função envelope

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(\vec{r}) \right] f_i(\vec{r}) = E_i f_i(\vec{r}), \quad \text{Eq. 3}$$

em que m^* é a massa efetiva do elétron no material. A introdução da massa efetiva assegura que a aproximação dada pela Eq. 2 valha para o caso de transições intersubbandas. Sem essa aproximação, seriam necessárias correções que levam em conta outras subbandas na função de onda de um elétron em um sistema na presença de campos eletromagnéticos (BASTARD, 1991).

Escolhendo z como a direção de crescimento da estrutura, e considerando o elétron livre no plano xy , a função envelope assume a forma

$$f_{ik_\perp}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{A}} e^{i\vec{k}_\perp \cdot \vec{r}} \phi_i(z), \quad \text{Eq. 4}$$

em que \vec{k}_\perp é o vetor de onda bidimensional (k_x, k_y) e A é a área da estrutura. Usando essa função, a equação de Schrödinger fica reduzida à sua forma independente do tempo unidimensional, com autovalores E_i^\parallel e autofunções ϕ_i

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) \right] \phi_i(z) = E_i^\parallel \phi_i(z). \quad \text{Eq. 5}$$

Nesse caso, a aproximação da massa efetiva garante a validade do método para o caso de transições intersubbandas, preservando a conservação de probabilidade de corrente (HELM, 2000).

As autoenergias são determinadas por

$$E_i = E_i^\parallel + \frac{\hbar^2 k_\perp^2}{2m^*}, \quad \text{Eq. 6}$$

onde as energias E_i^\parallel dependem da forma do potencial $V(z)$ e dos campos externos aplicados à estrutura. O termo proporcional a k_\perp^2 determina a energia do elétron no plano perpendicular à direção de crescimento da estrutura.

Para determinarmos o coeficiente de absorção, precisamos conhecer a forma da função de onda dos estados que participarão da transição, resolvendo a equação de Schrödinger. Nos casos mais simples como o caso do PQ infinito ou do PQ finito simétrico, a Eq. 5 pode ser resolvida analiticamente (BLÜMEL, 2005), porém para sistemas mais complexos, na presença de campos externos, a solução deve ser obtida numericamente. (DEGANI *et al.*, 2010)

Após determinarmos as funções de onda, precisamos calcular a probabilidade de transição de um elétron, sobre a ação de um campo eletromagnético (luz), excitado de um estado inicial $|i\rangle$ para um estado final $|f\rangle$, onde $\psi_i(\vec{r}) = \langle \vec{r} | i \rangle$ e $\psi_f(\vec{r}) = \langle \vec{r} | f \rangle$. Tal probabilidade pode ser obtida pela Regra Áurea de Fermi (BASTARD, 1991)

$$P_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle f | V | i \rangle|^2 \delta[E_f - E_i - \hbar\omega], \quad \text{Eq. 7}$$

em que $V = (e/2m^*)(\vec{A} \cdot \vec{p} + \vec{p} \cdot \vec{A})$ é o potencial de interação radiação-matéria. \vec{A} é o potencial vetor e e é a carga do elétron.

Do eletromagnetismo, podemos descrever uma onda eletromagnética plana, linearmente polarizada em termos de seu campo elétrico oscilante

$$\vec{E} = E_0 \vec{e} \cos(\vec{q} \cdot \vec{r} - \omega t). \quad \text{Eq. 8}$$

$\vec{e} = (e_x, e_y, e_z)$ é vetor de polarização, \vec{q} é o vetor de propagação e ω é a frequência desse campo. A partir do vetor campo elétrico podemos determinar o potencial vetor

$$\vec{A} = -\frac{iE_0 \vec{e}}{2\omega} \{e^{i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{r})} - e^{-i(\omega t - \vec{q} \cdot \vec{r})}\}. \quad \text{Eq. 9}$$

Para situações típicas, o vetor de propagação pode ser desprezado (BASTARD, 1991), uma vez que o comprimento de onda da radiação é muito maior que qualquer outro comprimento característico do sistema, aproximação também conhecida como aproximação de dipolo (HELM, 2000). Para transições intersubbandas, tal comprimento característico é a largura do poço quântico, de forma que tal condição é geralmente satisfeita. Por exemplo, para uma excitação com fótons de 100 meV, o comprimento de onda dessa luz é de cerca de 12 μm , enquanto que as larguras típicas dos poços quânticos não passam de 1 μm . Nesse caso, o campo elétrico da luz atua no sistema como um todo levando à comutação entre os operadores $[\vec{A}, \vec{p}] = 0$ e o potencial de interação pode ser simplesmente escrito como

$$V = \left(\frac{e}{m^*}\right) \vec{A} \cdot \vec{p}. \quad \text{Eq. 10}$$

A probabilidade de transição, na aproximação de dipolo, assume a forma

$$P_{if} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e^2 E_0^2}{4m^{*2} \omega^2} |\langle f | \vec{e} \cdot \vec{p} | i \rangle|^2 \delta[E_f - E_i - \hbar\omega]. \quad \text{Eq. 11}$$

Agora basta determinarmos o elemento de matriz $\langle f | \vec{e} \cdot \vec{p} | i \rangle$, o qual pode ser separado em termos das funções de Bloch e envelope (BASTARD, 1991)

$$\langle f | \vec{e} \cdot \vec{p} | i \rangle = \vec{e} \cdot \langle u_\nu | \vec{p} | u_{\nu'} \rangle \langle f_n | f_{n'} \rangle + \vec{e} \cdot \langle u_\nu | u_{\nu'} \rangle \langle f_n | \vec{p} | f_{n'} \rangle, \quad \text{Eq. 12}$$

onde ν (ν') e n (n') são os índices de banda e subbandas, respectivamente, do estado inicial (final).

Analisando a Eq. 12 por partes, a primeira integral do lado direito da expressão descreve as transições interbandas, enquanto que a segunda integral descreve as transições

intersubbandas. Olhando particularmente para o termo referente às transições intersubbandas, temos que este consiste de uma integral de *overlap* das funções de Bloch ($\langle u_\nu | u_{\nu'} \rangle$) que é nula para transições entre bandas diferentes ($\nu \neq \nu'$) e unitária para transições na mesma banda ($\nu = \nu'$), e de um elemento de dipolo elétrico entre funções envelope $\langle f_n | \vec{p} | f_{n'} \rangle$. A integral do elemento de dipolo elétrico entre as funções envelope é dada explicitamente por (HELM, 2000)

$$\langle f_n | \vec{e} \cdot \vec{p} | f_{n'} \rangle = \frac{1}{A} \int \phi_n^*(z) [\vec{e} \cdot \vec{p}] \phi_{n'}(z) e^{-i(\vec{k}_\perp - \vec{k}'_\perp) \cdot \vec{r}} d\vec{r}. \quad \text{Eq. 13}$$

A integral pode ser escrita como

$$\langle f_n | \vec{e} \cdot \vec{p} | f_{n'} \rangle = \frac{1}{A} \left\{ \int \int \phi_n^*(z) [e_z p_z] \phi_{n'}(z) e^{-i(\vec{k}_\perp - \vec{k}'_\perp) \cdot \vec{r}_\perp} d\vec{r}_\perp dz + e_\perp p_\perp \int e^{-i(\vec{k}_\perp - \vec{k}'_\perp) \cdot \vec{r}_\perp} d\vec{r}_\perp \int \phi_n^*(z) \phi_{n'}(z) dz \right\}. \quad \text{Eq. 14}$$

Considerando que as funções de onda são normalizadas, a integral $\int \phi_n^*(z) \phi_{n'}(z) dz = \delta_{n,n'}$. Assim, as polarizações no plano perpendicular à direção de crescimento, $e_\perp = (e_x, e_y)$, só contribuem para a absorção quando os estados inicial e final são os mesmos ($\vec{k}_\perp = \vec{k}'_\perp$ e $n = n'$). Essa regra de seleção é devida à impossibilidade de conservação simultânea de energia e momento durante a absorção de fótons por um elétron (BASTARD, 1991). Dessa forma, o termo que determina a transição intersubbanda no modelo de uma banda é

$$\langle f_n | \vec{e} \cdot \vec{p} | f_{n'} \rangle = \frac{1}{A} e_z \delta_{\vec{k}_\perp, \vec{k}'_\perp} \int \phi_n^*(z) p_z \phi_{n'}(z) dz. \quad \text{Eq. 15}$$

Nessa aproximação, apenas o campo elétrico com polarização e_z (onda eletromagnética com vetor de campo elétrico paralelo a z) pode gerar transições entre subbandas, isso se o vetor de onda for conservado, $\delta_{\vec{k}_\perp, \vec{k}'_\perp}$. Essa regra de seleção para transições intersubbandas tem implicações diretas em como os experimentos em poços quânticos são realizados. No caso de fotodetectores de infravermelho baseados em PQ, por exemplo, a incidência da luz não pode ser paralela à direção de confinamento, pois não excita portadores para gerar corrente. Essa dificuldade técnica tem sido sanada pela implantação de guias de onda e geometrias que permitem a incidência de luz de forma oblíqua nesses

dispositivos (GOOSSEN *et al.*, 1985). Os pontos quânticos devido ao confinamento nas três direções, no entanto, não apresentam esse tipo de regra de seleção.

2.2. Fotodetectores de Infravermelho

Dada a possibilidade de emprego das estruturas estudadas nesse trabalho como fotodetectores de infravermelho apresentamos a seguir alguns conceitos básicos sobre tais dispositivos.

Em linhas gerais, um fotodetector funciona por meio da coleção de portadores de carga gerados por algum processo de fotoexcitação, de modo que o estado final da excitação deve ser estendido o suficiente para permitir a extração do elétron da estrutura na forma de corrente elétrica. Como descrito na seção anterior, um exemplo dessa fotogeração ocorre em transições ópticas interbandas através do *band gap* de um material semiconductor. Controlando o *band gap* desses semicondutores, o espectro de absorção e o comprimento de onda de resposta do detector podem ser modificados (LEVINE, 1993; ROGALSKI, 2002). Porém, para conseguirmos um detector que opere na região do infravermelho, $\lambda \sim 10 \mu m$, utilizando-se transições interbandas é necessário um *band gap* muito pequeno, da ordem de ~ 0.1 eV. Contudo, materiais de *gap* tão estreito são caros e difíceis de serem crescidos, como é o caso do HgCdTe (HINDS *et al.*, 2011). Para resolver tal dificuldade, se utilizam transições intersubbandas em sistemas com confinamento quântico (poços quânticos e pontos quânticos) como discutido na seção 2.1.

Os fotodetectores de infravermelho baseados em poços quânticos comumente denominados QWIPs tem sido objeto de inúmeros estudos tanto teóricos (DEGANI *et al.*, 2011; ETTEH *et al.*, 2002; JAVONI *et al.*; SHIN *et al.*, 2011; TRINITÉ *et al.*, 2011) quanto experimentais (ALTIN *et al.*, 2011; HINDS *et al.*, 2011; HUANG *et al.*, 2011; LHILLIER *et al.*, 2009; DONCHEV *et al.*, 2002). Esse interesse é principalmente devido às suas diversas aplicações tanto civis quanto militares, dentre as quais destacamos a visão noturna, imageamento térmico, detecção não destrutiva, sensoriamento remoto, direcionamento de mísseis e detecção de câncer.

No entanto, muitas questões permanecem abertas com respeito aos mecanismos físicos que determinam propriedades importantes no desenvolvimento de detectores de infravermelho eficientes, que operem em temperaturas próximas à temperatura ambiente (ao menos na temperatura de nitrogênio líquido), possuam alta detectividade (alto desempenho) e alta uniformidade para integração em dispositivos grandes.

Desde o primeiro QWIP proposto por Levine e colaboradores (LEVINE *et al.*, 1987), o que se tem feito é aumentar ainda mais a absorção óptica, utilizando-se o confinamento quântico dos portadores de carga em estruturas com poços quânticos múltiplos e, conseqüentemente, aumentando sua eficiência (ALTIN *et al.*, 2011; HUANG *et al.*, 2011; DONCHEV *et al.*, 2002).

As vantagens da utilização de QWIP com relação aos fotodetectores de HgCdTe provêm do amadurecimento das técnicas de crescimento dos poços quânticos semicondutores, levando à alta uniformidade, excelente reprodutibilidade e, com isso, possibilidade de integração de dispositivos grandes e de custo reduzido (HINDS *et al.*, 2011). Outro ponto fundamental na utilização de QWIP está na facilidade de controle do comprimento de onda de absorção desses dispositivos, através da engenharia de níveis eletrônicos obtida pelo controle preciso da largura dos poços quânticos e da altura das barreiras de potencial (LEVINE, 1993).

Quando comparados a outros detectores, os QWIP apresentam algumas desvantagens. Dentre elas destacamos a necessidade de operação em temperaturas criogênicas para diminuir correntes de origem termiônicas (correntes de escuro) e a não absorção de radiação incidente perpendicularmente à estrutura devido a regras de seleção específicas. Assim como discutido na seção anterior, a não absorção de radiação perpendicular há tempos tem sido sanada pela utilização de grades de difração, guias de onda e pela incidência oblíqua da luz (GOOSSEN *et al.*, 1985). No entanto, o principal desafio continua sendo o desenvolvimento de fotodetectores de alto desempenho que possam operar em temperatura ambiente ou em temperaturas criogênicas que possam ser alcançadas com nitrogênio líquido (77 K) ou com o emprego de resfriadores termoelétricos (TEC - *thermoelectrics coolers*) (HINDS *et al.*, 2011).

A maioria dos estudos de QWIP tem se concentrado na operação no modo fotocondutivo (PC-QWIP), onde os portadores de carga fotoexcitados são removidos da região dos poços quânticos por um campo elétrico externo (LEVINE, 1993; GENDRON *et al.*, 2004; SCHNEIDER *et al.*, 1997). Porém, uma classe diferente de QWIP é formada por dispositivos com uma simetria de inversão espacial interna atuando como um campo elétrico intrínseco. Esses dispositivos podem ser operados sem a necessidade de campo elétrico externo, ou seja, no modo fotovoltaico PV-QWIP (SCHNEIDER *et al.*, 1997). Esse tipo de operação apresenta a vantagem do desaparecimento de correntes indesejadas e com o a ausência do ruído estatístico gerado pelos processos de criação-recombinação.

Como desvantagem, a fotocorrente dos PV-QWIP está associada a um ganho muito menor quando comparado aos PC-QWIP. No entanto, essa fotocorrente reduzida e os baixos níveis de ruído dão origem a detectividades similares entre QWIP fotocondutivos e

fotovoltaicos (HINDS *et al.*, 2011; SCHNEIDER, 1993). Portanto, PC-QWIP são melhores para aplicações que requerem altas respostas (grande responsividade) enquanto PV-QWIP são melhores para aplicações que requerem corrente de escuro baixa além de um ruído associado aos portadores de carga fotogerados extremamente pequeno (SCHNEIDER *et al.*, 1997). Esse é o caso do uso de fotodetectores de infravermelho para vigilância espacial. Esse tipo de aplicação frequentemente requer observação de objetos pouco emissivos em um *background* muito escuro, levando à necessidade do detector com ruídos extremamente menores que o ruído equivalente do *background*, exigindo um controle preciso da corrente de escuro (LHILLIER *et al.*, 2009).

2.3. Spintrônica

A spintrônica, em tradução livre “eletrônica de spins”, é um campo da Física relativamente novo que nasceu na década de 1980 a partir do surgimento do conceito de computação quântica proposto por Paul Benioff (BENIOFF, 1982) e de realizações experimentais relacionadas ao transporte eletrônico dependente de spin em sistemas de estado sólido (JOHNSON *et al.*, 1985; BAIBICH *et al.*, 1988; BINASCH *et al.*, 1989). Ela consiste basicamente da utilização de uma propriedade quântica intrínseca da matéria, o spin, para o desenvolvimento de uma lógica computacional nova, baseada em estados quânticos. Espera-se que essa lógica seja mais eficiente a ponto de superar a lógica binária conseguida com a eletrônica atual (FEYMANN, 1982; DEUSTCH, 1985). Desde então muito esforço tem sido feito em busca de materiais e técnicas capazes de fornecer os requisitos necessários para que o controle e manipulação de spin sejam alcançados de forma confiável e reproduzível.

De modo geral a implementação da spintrônica está alicerçada em três requisitos básicos (ZUTIC *et al.*, 2004): geração e controle da polarização de spin, coerência e detecção de spin. Esse é o tripé que sustenta e norteia a comunidade interessada em seu desenvolvimento.

Com o avanço das técnicas de crescimento e caracterização, os dispositivos semicondutores têm se mostrado potenciais candidatos para cumprir tais requisitos. Esses materiais se destacam principalmente por sua escalabilidade (YAMAMOTO *et al.*, 2012), por suas baixas taxas de descoerência (PEI *et al.*, 2012), eficiente injeção de corrente spin-polarizada proveniente de junções com materiais magnéticos (HANBICKI *et al.*, 2002; OHNO *et al.*, 2002), entre outras propriedades. Dentre os materiais semicondutores, destacamos os semicondutores magnéticos diluídos (DMS), realizados experimentalmente no

final da década de 1980 e início da década de 1990 (STORY *et al.*, 1986; OHNO *et al.*, 1992). Tais materiais são baseados na incorporação principalmente de íons de manganês na rede cristalina de compostos das famílias II-VI e III-V, como ZnSe e GaAs, respectivamente.

Como o magnetismo nessas estruturas provém dos íons de manganês (Mn) incorporados na rede cristalina, os DMS da família II-VI são interessantes, pois apresentam uma solubilidade muito alta quando comparada à solubilidade dos materiais da família III-V. No entanto, mesmo podendo incorporar altas concentrações de Mn os compostos da família II-VI apresentam ordem magnética apenas para temperaturas de poucos Kelvins (SATO *et al.*, 2010), os inviabilizando do ponto de vista tecnológico.

Por bastante tempo, a dificuldade de incorporação do manganês nos DMS baseados em compostos da família III-V, inviabilizou sua utilização como dispositivos spintrônicos. Isso porque a concentração de Mn que era possível de ser incorporada substitucionalmente era muito baixa e boa parte desse manganês entrava intersticialmente na rede cristalina na forma de impurezas, prejudicando assim o magnetismo de tais estruturas (DIETL, 2010; SAMARTH, 2012). Todavia, nos últimos anos, o interesse por tais estruturas tem se renovado, devido principalmente à diminuição na incorporação intersticial do Mn controlando-se as temperaturas de crescimento. Com isso se tem alcançando altas temperaturas de Curie, atingindo e até mesmo ultrapassando a temperatura ambiente (MUNETTA *et al.*, 2012; WALDOMIRO-PASCHOAL *et al.*, 2012; DOBROWOLSKA *et al.*, 2012).

A segunda parte dessa tese que trata de estruturas de PQ contendo camadas de material DMS pretende contribuir para o desenvolvimento de novas propostas de estruturas destinadas a aplicações como dispositivos spintrônicos.

3. O método do *Split Operator* na solução da equação de Schrödinger

Para a realização dos cálculos das propriedades ópticas responsáveis pela geração de corrente visando aplicações em dispositivos optoeletrônicos e spintrônicos propostos, foi utilizado o método do *Split Operator* na solução da equação de Schrödinger dependente do tempo. O método permite obter a evolução das funções de onda do sistema através da aplicação do operador quântico de evolução temporal

$$\psi(z, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t}\psi(z, t_0). \quad \text{Eq. 16}$$

Nesse método o Hamiltoniano do sistema $H = T + V$, é dado pela soma dos operadores de energia cinética e de energia potencial (DEGANI *et al.*, 2010). No entanto, como os operadores T e V não comutam, a aplicação da exponencial na evolução temporal não pode ser realizada exatamente. Podemos mostrar que

$$e^{-iH\Delta t/\hbar} = e^{-iV\Delta t/2\hbar}e^{-iT\Delta t/\hbar}e^{-iV\Delta t/2\hbar} + O(\Delta t^3), \quad \text{Eq. 17}$$

em que $O(\Delta t^3)$ é o erro associado à separação da exponencial em termos individuais dos operadores T e V , que pode ser computado arbitrariamente.

A evolução temporal fornece as funções de onda do sistema em função do tempo, por meio das quais podemos analisar a dinâmica dos elétrons na estrutura. De modo específico, podemos obter a densidade de corrente do sistema que, sob a ação da excitação do sistema com luz, como

$$J(\vec{r}, t) = \Re \left[\frac{-i\hbar}{m^*} \langle \psi(t) | \nabla | \psi(t) \rangle \right]_{r=\pm r_c}. \quad \text{Eq. 18}$$

onde r_c é um ponto no qual será calculada a corrente, fora da parte ativa do potencial. A densidade de corrente pode ser integrada temporalmente para obtermos a fotocorrente proveniente dessa estrutura (MAIALLE *et al.*, 2011)

$$I = \frac{e}{T_f} \int_0^{T_f} (J_{dir}(\vec{x}, t) - J_{esq}(\vec{x}, t)) dt. \quad \text{Eq. 19}$$

O método permite ainda obter os autoestados (autofunções e autoenergias) simplesmente e diretamente fazendo a evolução dos sistemas em tempo imaginário, substituindo $t \rightarrow i\tau$ na Eq. 16. Podemos determinar ainda as forças de oscilador que podem ser obtidas e a absorção óptica derivada por meio da Regra Áurea de Fermi. Os estados excitados dos sistemas, necessários para o cálculo, podem também ser obtidos pela evolução temporal em tempo imaginário, sendo evoluídos e ortonormalizados entre si pelo método de Gram-Schmidt.

No caso das estruturas contendo um potencial efetivo dependente de spin nas camadas de semicondutores magnéticos diluídos, gerado pela presença do campo magnético (ver seção 5), podemos obter todas as propriedades mencionadas anteriormente tanto para a componente de spin *up* quanto para a componente de spin *down*. Sendo assim, temos acesso direto, por exemplo, à polarização de spin da fotocorrente proveniente de tais estruturas.

As propriedades de transporte, como transmissão eletrônica através da estrutura, foram calculadas numericamente resolvendo-se a equação de Schrödinger independente do tempo, por meio da análise de ondas planas incidentes, refletidas e transmitidas pelo potencial, sujeitas a condições de continuidades das funções de onda e de suas derivadas nas bordas do potencial. Os detalhes do método de obtenção dos espectros de transmissão encontram-se no Apêndice B.

É importante salientar que no método do *Split Operator* a solução da equação de Schrödinger é obtida exatamente, sem a utilização de aproximações de pequenos campos, como nas teorias de perturbação (DEGANI *et al.*, 2010). Dessa forma a aplicação de campos externos é tratada em pé de igualdade, como o que ocorre com a resposta do sistema ao campo elétrico estático e ao campo elétrico oscilante simulando a atuação de luz sobre os potenciais analisados. Mais ainda, com esse método, não precisamos realizar expansões em base, para depois realizar diagonalizações do Hamiltoniano do sistema. Também não precisamos nos preocupar em encontrar simetrias que anulem elementos de matriz do Hamiltoniano expandido numa base específica, para facilitar a diagonalização. As regras de seleção e as simetrias inerentes ao sistema são fornecidas diretamente pelo método.

No caso da resposta dinâmica do sistema a perturbações externas, não precisamos conhecer a priori os estados excitados, localizados ou de contínuo, para os quais o elétron será excitado. Obtemos, por exemplo, a fotocorrente proveniente de um elétron localizado no estado fundamental de um PQ apenas por meio do cálculo da densidade de corrente desse estado.

Dessa forma, estamos lidando com um método muito eficiente que é capaz de fornecer informações valiosas sobre os sistemas analisados no presente trabalho, cujos resultados serão apresentados nas seções posteriores.

A descrição completa do método está apresentada no Apêndice A.

4. Fotocondutância negativa em poços quânticos múltiplos com barreira de filtro na presença de campo elétrico¹

Mesmo tendo em vista a grande quantidade de trabalhos que tratam da Física de poços quânticos, com o avanço das técnicas experimentais, no que tange tanto o crescimento quanto a caracterização, conceitos considerados antigos, fenômenos e novas aplicações relacionadas a tais estruturas (FAIST *et al.*, 1996; GMACHL *et al.*, 1998; HINDS *et al.*, 2011; MUNETA *et al.*, 2012; HUANG *et al.*, 2011), tem voltado a chamar a atenção da comunidade científica e muitas questões permanecem abertas e precisam ser respondidas (HINDS *et al.*, 2011; MUNETA *et al.*, 2012). Como estamos tratando de sistemas em que o confinamento quântico é o ingrediente principal, a solução da equação de Schrödinger fornece as informações necessárias para lidarmos com tais sistemas. Mais ainda, como esses sistemas estão sujeitos à interação com campos externos, sejam esses elétricos, magnéticos ou mesmo luz, devemos ter acesso à resposta dos estados localizados e de contínuo às perturbações externas.

Através da solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo, propomos o estudo do movimento eletrônico assistido por luz na presença de um campo elétrico de uma estrutura semicondutora de poços quânticos múltiplos (PQM) acoplados a um quase-contínuo de estados modulado pela presença das barreiras de filtro acima das barreiras dos poços (BEZERRA *et al.*, 2014). Nesse trabalho, observamos uma série de ressonâncias nas curvas de fotocorrente *versus* energia dos fótons incidentes, as quais entendemos em termos das contribuições individuais de cada um dos poços quânticos. Os deslocamentos dessas ressonâncias com o campo elétrico descrevemos em termos dos estados eletrônicos envolvidos na fotogeração de corrente, revelando o papel dos estados localizados e dos estados estendidos no espectro de estados de quase-contínuo de energias acima dos poços. Além dessas propriedades, também observamos a geração de fotocorrente reversa, contra o campo elétrico (SIRTORI *et al.*, 1993), para certos comprimentos de onda dos fótons incidentes e campos elétricos pequenos. Observamos o surgimento de uma fotocondutância negativa, controlada pelo campo elétrico aplicado à heteroestrutura. Atribuímos essa condutância negativa à interação entre estados localizados e estendidos no contínuo. Tal interação se manifesta na forma de *anticrossings* entre tais estados e o aumento da fotocorrente nesses *crossings* foi associado a transições do tipo Landau-Zener-Stückelberg-Majorana, (LANDAU, 1932; ZENER, 1932; STUECKELBERG; MAJORANA, 1932) induzidas dinamicamente na região dos *anticrossings* (RIBEIRO *et al.*, 2013).

¹ O texto desta seção foi desenvolvido seguindo de modo próximo o do artigo de Bezerra *et al.* (2014a)

Nas próximas seções apresentamos os detalhes estruturais da estrutura de PQM sobre análise, mostramos os resultados obtidos e sua interpretação e tecemos algumas conclusões sobre o estudo.

4.1. Design da estrutura

O perfil de potencial da heteroestrutura de poços quânticos múltiplos (PQM) proposta está esquematizado na Figura 3. É formada por dez poços quânticos de GaAs de 5 nm de espessura, separados entre si por barreiras de $\text{Al}_{0.15}\text{Ga}_{0.85}\text{As}$ de 11 nm de espessura. No centro de cada uma das barreiras adicionamos uma barreira de $\text{Al}_{0.30}\text{Ga}_{0.70}\text{As}$ de 3 nm de espessura, a qual denominamos barreira de filtro.

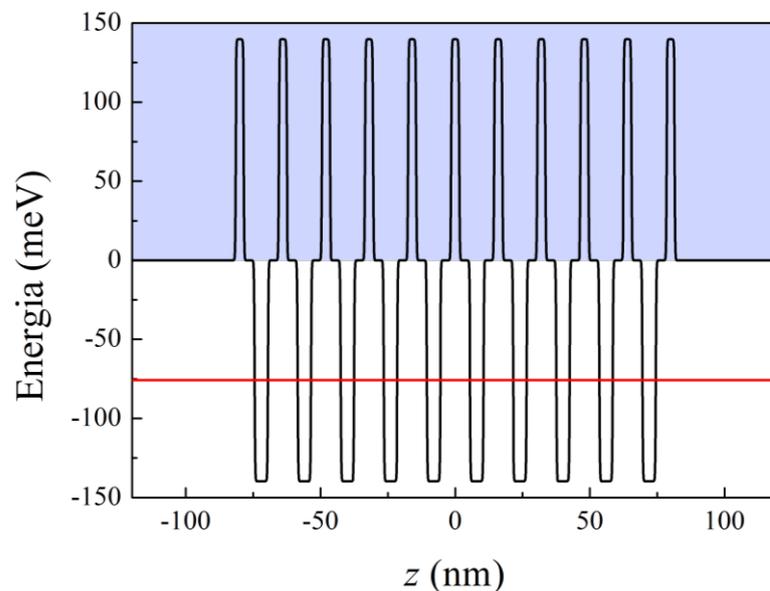


Figura 2 – Perfil de potencial da heteroestrutura de poços quânticos múltiplos. A linha vermelha mostra a energia do estado fundamental dos poços, os quais têm quase a mesma energia na ausência de campo elétrico aplicado. A região azul representa o quase-contínuo de estados formado na região das barreiras de filtro.

As barreiras de filtro têm como objetivo modular o contínuo de estados estendidos como estados de quase-contínuo (KILEDJIAN *et al.*, 1991). Esses estados têm maior superposição com os estados ligados nos PQ, garantindo maior eficiência das transições, enquanto são suficientemente estendidos ao longo da direção de crescimento da estrutura, permitindo geração de corrente mais intensa. Como podemos notar na Figura 2, na ausência de campo elétrico aplicado à estrutura, os estados fundamentais de cada um dos poços possuem energias muito próximas, em torno aproximadamente de -76 meV. Essa pequena separação entre os estados ligados nos poços está basicamente associada ao pequeno acoplamento entre os PQ, os quais são separados por barreiras largas de 14 nm. Em consequência, diminui o tunelamento entre poços adjacentes. Dessa forma, a estrutura

proposta pode ser classificada como uma estrutura de poços quânticos múltiplos, diferentemente do caso de uma superrede a qual seria identificada pela formação de minibandas na região dos poços.

Entretanto, na região do contínuo de energias acima dos poços, as barreiras de filtro são estreitas de modo a permitir a formação de um perfil de potencial do tipo superrede finita. Nesse caso, os elétrons nessa região podem facilmente tunelar entre poços adjacentes como se estivessem submetidos a um potencial periódico. Nesse contexto, como o que ocorre no modelo de Kronig-Penney para redes periódicas, os níveis discretos de energia dão origem a minibandas de energia como antecipado acima.

4.2. Resultados e Discussão

Na Figura 3, apresentamos a probabilidade de transmissão através da estrutura na região das barreiras de filtro, calculada pelo método descrito no apêndice (B.3). Como esperado, notamos a formação de estruturas do tipo minibandas com dez estados, onde cada pico é referente a um dos poços quânticos. Realizamos o cálculo da probabilidade de transmissão mostrado na figura sem a aplicação de campos externos mantendo a estrutura simétrica, garantindo 100% de transmissão. Essa é uma extensão direta do caso da transmissão unitária de uma estrutura de dupla barreira simétrica. A largura da primeira minibanda (MB1), centralizada em 50 meV, é de aproximadamente 20 meV, sendo esta formada pelos estados que participam do processo de transição intersubbanda responsável pela geração de fotocorrente.

Como mostra a Figura 4, os estados que formam as minibandas fazem parte do quase-contínuo de energia, apresentando localização na região das barreiras de filtro, porém permanecendo estendidos o suficiente para permitir a geração de corrente. Dessa forma, por meio de transições intersubbandas podemos excitar elétrons localizados nos poços quânticos para os estados da primeira minibanda, gerando corrente. Esperamos assim, observar um pico de fotocorrente para excitações com fótons com energias em torno de 125 meV, que é a separação média entre os estados localizados nos poços e o centro da primeira minibanda na ausência de campo elétrico. Esse resultado pode ser diretamente observado na fotocorrente proveniente da estrutura, mostrada na Figura 5.

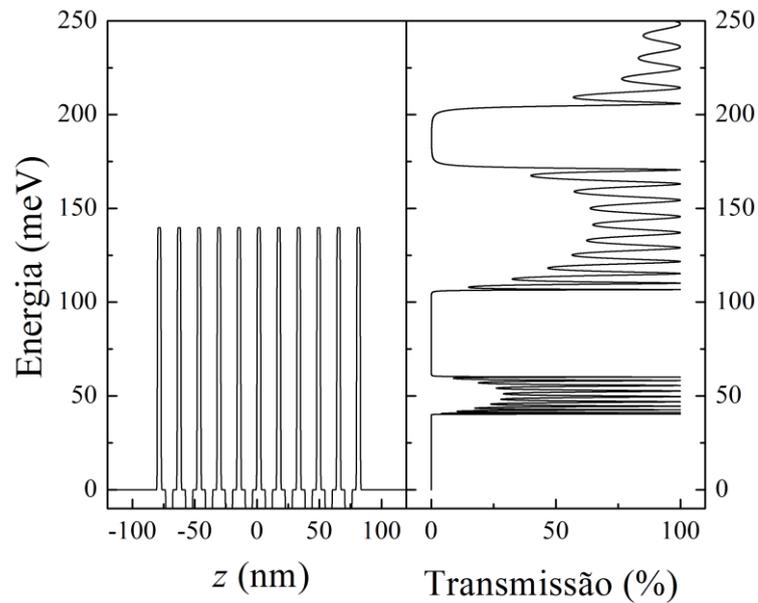


Figura 3 – (a) Detalhe do perfil de potencial na região das barreiras de filtro, através da qual a (b) probabilidade de transmissão foi calculada. Podemos notar a formação de minibandas na região do contínuo, onde a probabilidade de transmissão é total, o que é devido à simetria da estrutura na ausência de campo elétrico.

Calculamos a fotocorrente através das autofunções obtidas pelo método do *Split Operator* (ver detalhes no apêndice A), no qual uma função de onda inicial é evoluída no tempo dada pela Eq. 16.

O Hamiltoniano na presença do campo elétrico estático com intensidade F_s e na presença do campo oscilante fazendo o papel da luz iluminando o sistema, com intensidade F_d e frequência ω , é então dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - ez(F_s - F_d \sin(\omega t)) + H_{\parallel}(x, y), \quad \text{Eq. 20}$$

onde e é a carga do elétron. A partir daqui, nos referiremos a $\hbar\omega$ como a energia do fóton incidente. Assumimos que $H_{\parallel}(x, y)$ é invariante por translação no plano xy , assim o movimento eletrônico é livre nessas direções, de modo que o elétron pode ser descrito como uma onda plana.

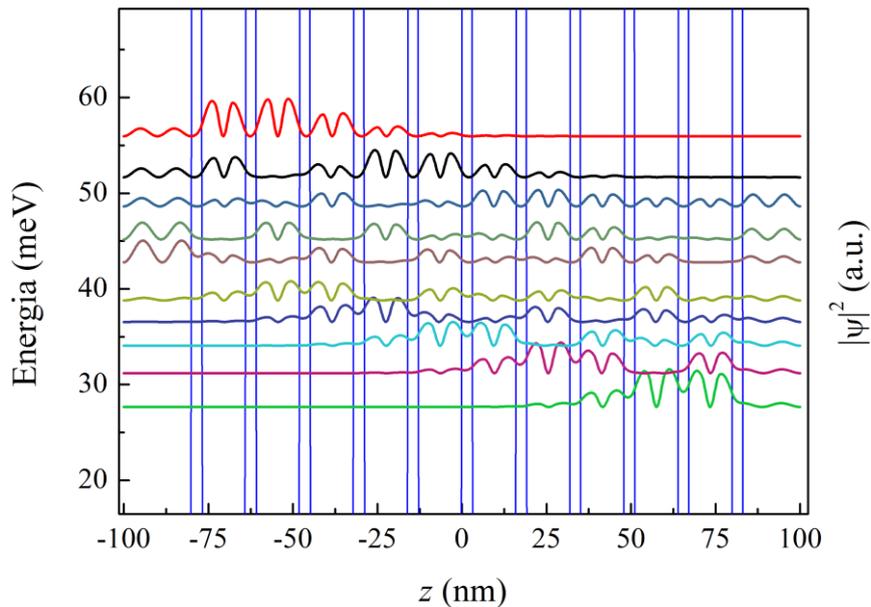


Figura 4 – Detalhe da estrutura mostrando o módulo quadrado das autofunções que formam a primeira minibanda, para $F_s = 1 \text{ kV cm}^{-1}$.

Para obter a fotocorrente calculamos a densidade de corrente através da Eq. 18 e a integramos no tempo como na Eq. 19. De modo mais específico, primeiramente fazemos a evolução em tempo imaginário utilizando o método do *Split Operator* determinando os estados estacionários de cada um dos poços, onde evoluímos dez funções de onda iniciais (gaussianas) ortonormalizadas a cada passo de tempo, até a convergência de suas energias, com um erro relativo entre passos consecutivos da evolução temporal da ordem de 10^{-9} . Utilizamos cada um desses estados como estado inicial da evolução em tempo real na presença do campo oscilante. A partir da função de onda evoluída no tempo, calculamos a densidade de corrente integrada no tempo, determinando a fotocorrente proveniente de cada um dos dez poços. Somando as contribuições individuais obtemos a fotocorrente total proveniente da estrutura como mostrado na (Figura 5).

Como mostra a Eq. 19, para determinarmos a fotocorrente a densidade de corrente deve ser integrada desde $t = 0$ até um limite superior de tempo $t = T_f$, o qual também define a duração da evolução temporal. Para especificarmos esse limite superior de tempo, consideramos que ao escolhermos o estado fundamental dos PQ como estado inicial da evolução, estamos na verdade inicializando o sistema com um elétron ocupando tal estado fundamental. Sendo assim, como a ação do campo oscilante é cumulativa no tempo, o estado fundamental pode ser completamente ionizado para intervalos de tempo grandes e a corrente atingirá um valor de saturação (MAIALLE *et al.*, 2011), o qual utilizamos como limite superior de tempo T_f . Porém, esse tempo de saturação ocorre em tempos diferentes para diferentes energias de excitação e amplitudes do campo oscilante. Sendo assim, antes de

realizar de fato a simulação da fotocorrente desse sistema, analisamos a saturação da fotocorrente. O tempo de saturação encontrado é da ordem de $T_f = 1 \text{ ps}$.

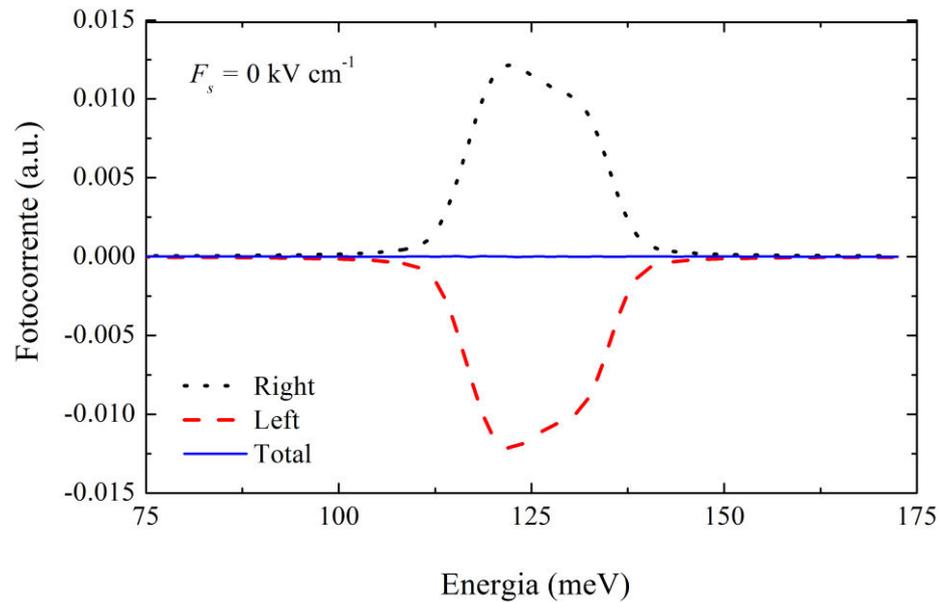


Figura 5 – Fotocorrente sem campo elétrico aplicado à estrutura, mostrando as componentes calculadas do lado esquerdo (curva tracejada vermelha) e do lado direito da estrutura (curva pontilhada preta). A corrente total proveniente da soma das componentes (curva cheia azul), o qual é nula devido à simetria da estrutura, é também apresentada.

Sendo a fotocorrente total da estrutura (curva cheia azul na Figura 5) proveniente da soma das contribuições da fotocorrente do lado esquerdo (curva tracejada vermelha) e do lado direito da estrutura (curva pontilhada preta), calculada em pontos distantes 10 nm das barreiras externas do potencial. Devido à simetria do potencial na ausência de campo elétrico ($F_s = 0 \text{ kVcm}^{-1}$), temos que a fotocorrente total é nula. Mesmo assim, o método nos permite observar que as componentes da direita e da esquerda da corrente apresentam picos em torno de 125 meV, os quais se cancelam. Obtemos tais resultados para um campo oscilante com amplitude $F_d = 5 \text{ kV cm}^{-1}$. Na ausência de campo elétrico estático, as funções de onda dos estados ligados nos poços são estendidas sobre praticamente todos os poços, apresentando um bom *overlapping* com todas as funções de onda da primeira minibanda, originando um pico de fotocorrente com aproximadamente a largura dessa minibanda.

Ao aplicarmos campo elétrico a simetria da estrutura é quebrada, uma das componentes de fotocorrente é favorecida e uma corrente líquida é esperada. Particularmente, escolhemos o sentido do campo elétrico de forma que o perfil de potencial é deformado devido ao efeito de localização de Wannier-Stark e a componente da direita da fotocorrente é favorecida. Nessa configuração, as energias dos estados localizados nos poços quânticos se separam e os estados se localizam cada qual em seu respectivo PQ. Tal localização dá origem

à chamada *Stark ladder* (MENDEZ *et al.*, 1988; DEGANI, 1991), onde a separação energética entre os estados de poços adjacentes é

$$\Delta E = eF_s d, \quad \text{Eq. 21}$$

em que d é o tamanho de um período de repetição da estrutura. Nesse caso, não foram adicionadas ao potencial camadas de depleção adjacentes às barreiras externas, como ocorre em estruturas reais nas quais deseja-se separar os contatos elétricos da região ativa da estruturas, evitando-se difusão de dopantes nessa região (GALETI *et al.*, 2013). A largura dessas camadas pode influenciar diretamente no espectro eletrônico da estrutura, alterando conseqüentemente a resposta da fotocorrente com o campo elétrico, adicionando mais um fator estrutural que deve ser controlado.

Na Figura 7, estão representados os módulos quadrados das autofunções da estrutura de PQM para um campo elétrico estático $F_s = 5 \text{ kV cm}^{-1}$. Podemos observar a localização de Wannier-Stark dos estados dos PQ, em que o período de repetição d é determinado pela soma da largura do PQ individual e a da barreira que separa poços adjacentes, como indicado na Figura 6. Para essa intensidade de campo estático, a separação entre os estados dos poços nos extremos da estrutura é $\Delta E_t = 10 eF_s d = 80 \text{ meV}$.

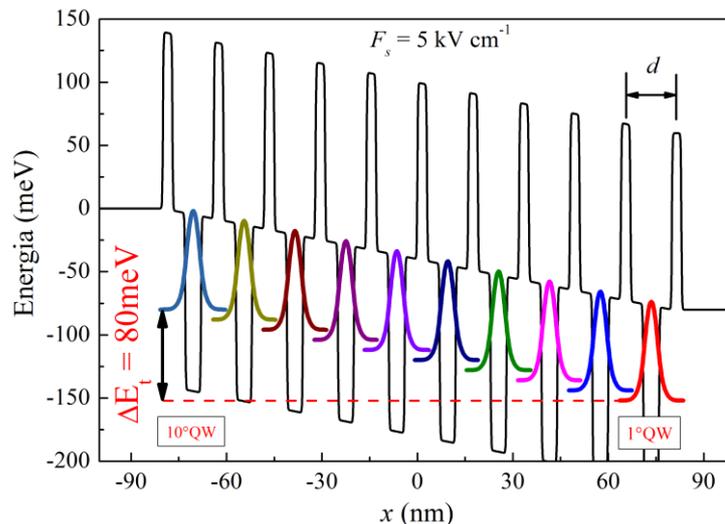


Figura 6 – Perfil de potencial da estrutura de poços quânticos múltiplos na presença de campo elétrico $F_s = 5 \text{ kV cm}^{-1}$. São mostrados os autoestados dos poços quânticos, os quais são localizados formando a chamada *Stark ladder*, cuja separação total entre os estados localizados nos poços dos extremos $\Delta E_t = 10 eF_s d = 80 \text{ meV}$.

O mesmo tipo de localização ocorre para os estados de contínuo na região das barreiras de filtro, com um período de repetição igual ao período dos PQM. Sendo assim, mesmo que as energias dos estados localizados e os estados das minibandas sejam alteradas

pela presença do campo externo, esperamos que a separação relativa entre estados de um mesmo poço permaneça inalterada e que o pico de fotocorrente não mude de posição com o aumento do campo elétrico.

Para simplificar a análise dos resultados, mesmo sabendo da localização dos estados do quase-contínuo, continuaremos a nos referir a tais estados como minibandas. Além disso, a partir deste ponto os PQs são ordenados partindo do lado direito para o lado esquerdo da estrutura como 1° PQ até 10° PQ, em que a energia do 1° PQ é menor que a energia do 10° PQ, devido à localização de Wannier-Stark (ver Figura 6).

A Figura 7 representa o principal resultado do presente estudo: a dependência da fotocorrente da estrutura de PQM com o campo elétrico aplicado, para um campo oscilante $F_d = 5 \text{ kV cm}^{-1}$. Observamos a presença de três regiões de campos elétricos em que o comportamento da fotocorrente é claramente distinto. Entretanto, como esperado a energia do pico principal é pouco sensível ao campo elétrico. Vemos a presença de uma região de baixos valores de campo, em que se encontram picos de corrente negativa. Outra região de campos intermediários, em que a fotocorrente é reduzida e uma região de valores grandes de campo em que a corrente aumenta consideravelmente. Podemos observar ainda o aparecimento de picos satélites com uma dependência muito significativa com o campo elétrico. Para entender melhor o espectro de fotocorrente na Figura 7, consideramos separadamente a contribuição individual da cada um dos poços para a fotocorrente total.

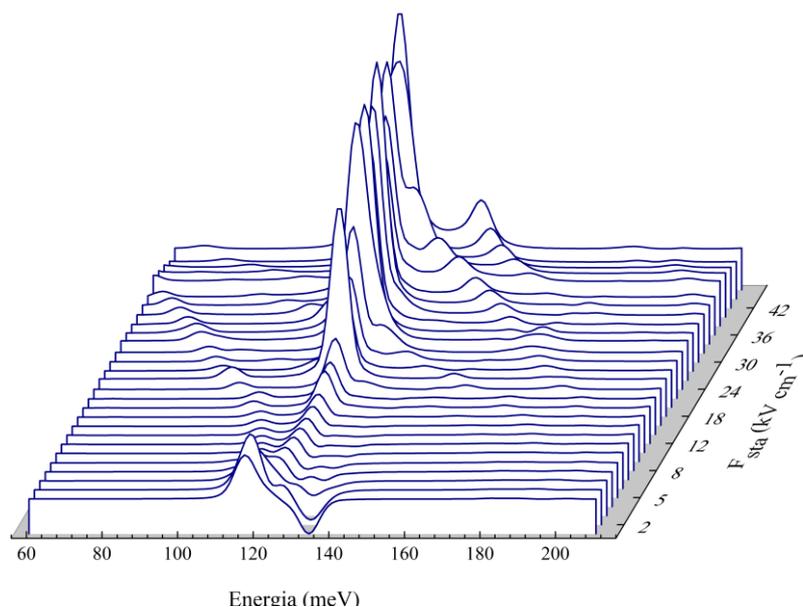


Figura 7 - Espectro de fotocorrente para diferentes campos elétricos aplicados à estrutura de PQM. Temos que as regiões das curvas em que a fotocorrente é constante (linhas horizontais) representam as linhas de base para o eixo vertical onde a corrente é nula. Sendo assim, podemos notar que para baixos valores de campo elétrico, alguns valores de corrente são negativos.

Na Figura 8, apresentamos a fotocorrente de cada um dos PQ separadamente como função do campo elétrico. Notamos (mas não mostramos aqui) que para os regimes de baixos e altos valores de campo elétrico, a contribuição principal para a fotocorrente é proveniente dos poços localizados nos extremos da estrutura, isto é, 1° e 2° PQ, 9° e 10° PQ. Sendo assim, é suficiente entendermos o comportamento da fotocorrente de tais poços para entendermos o comportamento da fotocorrente total.

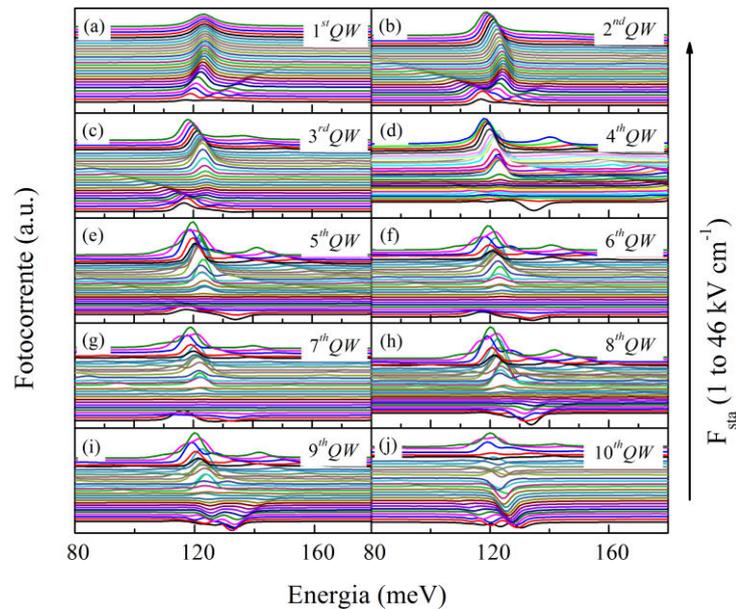


Figura 8 – Espectros de fotocorrente dos PQ mostrados individualmente, como função do campo elétrico variando de 1 a 46 kV cm^{-1} . Os painéis (a) ao (j) são relacionados à fotocorrente do 1° PQ e ao 10° PQ, respectivamente. As curvas foram deslocadas verticalmente para permitir uma melhor visualização. As regiões das curvas em que a fotocorrente é constante (linhas horizontais) representam as linhas de base para o eixo vertical onde a corrente é nula.

Na Figura 8(a) mostramos os espectros de fotocorrente para o 1° PQ. Notamos a presença de um pico principal em torno de 120 meV para pequenos campos, o qual sofre um pequeno desvio para o azul (maiores energias), permanecendo em torno de 125 meV para campos maiores. Observamos a presença de um pico satélite bastante sensível ao campo elétrico, também sofrendo um desvio para o azul, cuja variação na energia do pico obedece aproximadamente à Eq. 21. Esse pico satélite desaparece para valores intermediários de campo. Associamos o pico principal à transição entre o estado fundamental do 1° PQ e os estados da MB1. Para baixos valores de campo elétrico, como mostra a Figura 4, os estados da MB1 são praticamente estendidos sobre todos os poços quânticos, de forma que a transição pode ocorrer não somente entre os estados referentes ao 1° PQ, mas também para os estados dos poços adjacentes, alargando o pico da fotocorrente. Com o aumento do campo, cada estado passa a se localizar em seu respectivo PQ, de modo que o *overlapping* entre o estado

fundamental do 1° PQ e seu estado correspondente na MB1 aumenta, enquanto que o *overlapping* com os estados da MB1 dos poços adjacentes diminui. Como a dependência da energia dos estados dos PQ e da MB1 com o campo elétrico é praticamente a mesma, o aumento do campo não altera a separação relativa entre estados do mesmo PQ. Em consequência a posição do pico de fotocorrente permanece inalterada com a aplicação do campo elétrico, para os intervalos de campo considerados nesse trabalho.

O pico satélite na Figura 8(a) corresponde à transição entre o estado localizado no 1° PQ e no segundo estado da MB1 pertencente ao 2° PQ. Nesse caso, a energia relativa entre tais estados na presença do campo elétrico mostra exatamente a formação da *Stark ladder*. Com a localização do estado da MB1 no 2° PQ, o *overlapping* com o estado fundamental do 1° PQ diminui, resultando na diminuição do segundo pico. Esse comportamento pode ser visualizado na Figura 9(a), que mostra os espectros de transmissão como função do campo elétrico na região da MB1. Para fazermos uma comparação direta com os espectros de fotocorrente, somamos a energia do estado fundamental do 1° PQ na energia das curvas de transmissão. As setas são guias para os olhos das posições dos picos de transmissão, cujo comportamento é muito semelhante ao dos picos nas curvas de fotocorrente na Figura 8(a).

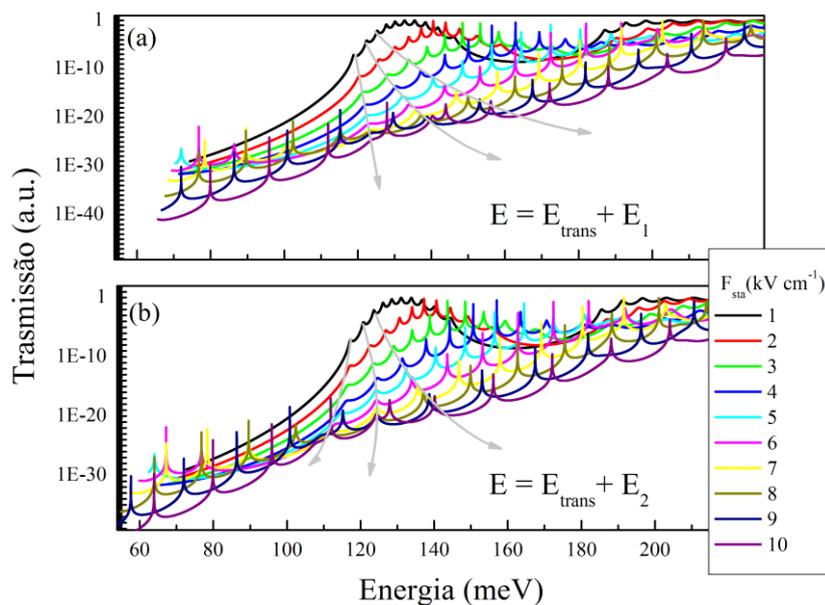


Figura 9 – Espectros de transmissão para vários valores de campo elétrico. Para obter uma comparação direta com os espectros de fotocorrente, foi somada a energia do estado fundamental do (a) 1° PQ e do (b) 2° PQ. As setas são guias para os olhos das posições dos picos de transmissão, cujo comportamento é muito semelhante aos picos nas curvas de fotocorrente das Figura 8(a) e (b).

Similarmente, o comportamento da fotocorrente do 2° PQ é mostrado na Figura 8(b), na qual observamos a presença de um pico principal pouco dependente do campo e de dois picos satélites que sofrem desvios um para o azul e outro para o vermelho (menores energias).

Mais uma vez o pico principal está associado à transição entre estados do mesmo poço e os picos satélites associados à transição entre estados de poços adjacentes, conforme previsto na Eq. 21. Esse comportamento pode também ser visualizado nas curvas de transmissão da Figura 9(b), às quais foi somada a energia do estado fundamental do 2º PQ. Mais uma vez as setas determinam a variação dos picos de transmissão com o campo elétrico e reproduzem muito bem o comportamento dos picos de fotocorrente da Figura 8(b).

Partimos agora para a análise da contribuição para fotocorrente total dos 9º PQ e 10º PQ do lado esquerdo da estrutura de PQM com barreiras de filtro. Como vemos nas Figura 8(i) e (j), a contribuição da fotocorrente relativa a esses PQ apresenta valores negativos (ou seja, a corrente flui contra o campo elétrico) para baixos valores de campo, tornando-se positiva com o aumento do campo elétrico. Este fenômeno foi demonstrado e bem discutido por Sirtori e colaboradores (SIRTORI *et al.*, 1993) e está relacionado com a transição entre o estado fundamental e os estados de energia mais altos de MB1 que se estendem ao longo do lado esquerdo da estrutura de PQM (ver Figura 4), permitindo uma condução dos elétrons contra o sentido do campo elétrico. Ao aumentar ainda mais o campo elétrico a estrutura torna-se transparente aos elétrons fotoexcitados, favorecendo a ação desse campo na produção de fotocorrente positiva. As mudanças nas posições dos picos satélites e a diminuição das intensidades desses picos também estão relacionadas com a formação da *Stark ladder* e a diminuição do *overlapping* entre as funções de onda de diferentes PQ, respectivamente. A fotocorrente dos poços intermediários da estrutura de PQM apresenta um comportamento similar ao discutido para os poços externos da estrutura, apresentando o pico principal de fotocorrente, além dos picos satélites, como podemos observar nas Figuras 8(c)-(h).

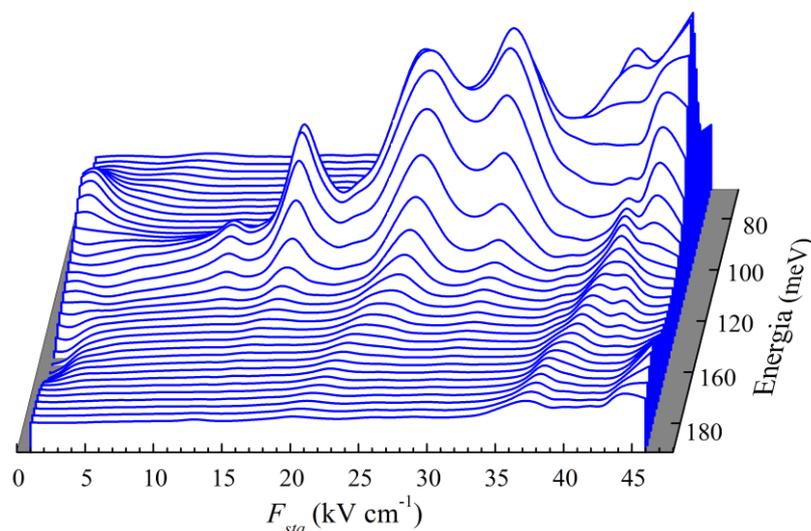


Figura 10 – Outra visualização dos espectros de fotocorrente mostrados na Figura 8.

Uma observação mais atenta para a dependência da fotocorrente total com o campo elétrico permite concluir que na Figura 10 (que apresenta outra visualização dos mesmos resultados da Figura 7) a intensidade do pico principal em torno de 125 meV de início diminui, mas começa a aumentar com o aumento do campo elétrico. A origem do decréscimo na intensidade do pico principal de fotocorrente para campos intermediários está diretamente relacionada às mudanças nas posições dos picos de corrente positiva e negativa, devido à localização de Wannier-Stark, já discutida quando da apresentação das Figura 8 (a) e (j), respectivamente. Voltamos a chamar a atenção, a partir dessas figuras, que o pico positivo sofre um ligeiro desvio para o azul enquanto que o pico de fotocorrente negativa sofre um desvio para o vermelho com o aumento do campo elétrico. Como esperado, na região de valores intermediários de campo elétrico as intensidades desses picos parcialmente se cancelam, diminuindo assim a fotocorrente total.

Como discutido anteriormente, o aumento do campo elétrico torna a estrutura transparente para os elétrons excitados nos estados superiores da MB1, de modo que a corrente dos poços externos do lado esquerdo da estrutura deixa de ser negativa e passa a ser positiva. Sendo assim, temos que a competição entre os picos de corrente positiva com os de corrente negativa cessa e a fotocorrente total volta a aumentar. No entanto, não obtemos um aumento monotônico da fotocorrente. Observamos a presença de picos cuja origem difere dos processos discutidos anteriormente. A presença dessas oscilações na intensidade da fotocorrente está associada à mistura entre estados localizados e estendidos na região das barreiras de filtro.

Ao introduzir as barreiras de filtro na estrutura, obtemos na região do contínuo de energias os estados organizados na forma de minibandas, os quais se tornam localizados na presença do campo elétrico, mas se mantêm suficientemente estendidos sobre a estrutura de modo a gerar fotocorrente. Assim, temos um acoplamento dependente do campo entre os estados ligados nos poços com os estados no contínuo. Com o aumento do campo elétrico, observamos também um acoplamento entre os estados das minibandas na forma de *anticrossings* que podem ser vistos na dependência do espectro de energia com o campo elétrico na Figura 11(a). Essa dependência com o campo elétrico dos estados das minibandas é proveniente da mudança na energia desses estados devido à localização de Wannier-Stark.

Nas Figura 11(b) e (c) nos concentramos na região do espectro de energia destacada pelo círculo vermelho na Figura 11(a), na qual o *anticrossing* entre os estados da MB1 e da segunda minibanda (MB2) é claramente observado. Os tamanhos dos pontos na Figura 11(b) são proporcionais o *participation ratio* definido por Bell e Dean (BELL *et al.*, 1970) em seu

trabalho baseado no modelo de Anderson sobre vibrações atômicas em Sílica vítrea. Nesse estudo eles discutiram o grau de localização espacial dos modos vibracionais que determinam a condutividade térmica dos vidros, assim como a influência da extensão espacial dos estados eletrônicos na condutividade elétrica em sólidos. Eles introduziram o *participation ratio* como uma quantidade específica para determinar o grau de localização espacial. Podemos inferir que para sistemas grandes, não devemos ter dificuldades de diferenciar entre funções de onda localizadas, cuja amplitude diminui exponencialmente para pontos distantes do centro de localização, de funções de onda estendidas sobre todo o sistema (EDWARDS *et al.*, 1972). Entretanto devemos ser capazes de determinar a localização em quaisquer tipos de sistemas. Para tanto utilizamos o *participation ratio*, definida como

$$P = \frac{1}{L} \frac{(\int |\Psi(x)|^2 dx)^2}{\int |\Psi(x)|^4 dx}, \quad \text{Eq. 22}$$

onde $\Psi(x)$ são autofunções do sistema e L é a sua dimensão linear. O numerador é unitário para o caso de autofunções normalizadas. Desde o trabalho de Bell e Dean (BELL *et al.*, 1970), muitos outros trabalhos utilizaram o *participation ratio* para determinar localização espacial de autofunções de sistemas semicondutores (AOKI, 1982; OHNO, 1982; EDWARDS *et al.*, 1972).

No caso limite de estados estendidos sobre todo o sistema, temos que devido à condição de normalização,

$$\langle \Psi(x) | \Psi(x) \rangle = \int_0^L \psi^* \psi dx = 1 \quad \text{Eq. 23}$$

a autofunção é proporcional ao inverso do tamanho do sistema

$$\Psi(x) \propto \frac{1}{\sqrt{L}}, \quad \text{Eq. 24}$$

de forma que $P \propto 1$. Para o outro extremo, um estado localizado tem uma autofunção que diminui exponencialmente com a distância do centro de localização $\Psi_{\pm\infty} \Rightarrow 0$. Nesse caso, tanto o denominador quanto o numerador de P tendem para um, e $P \sim L^{-1}$. Portanto, o *participation ratio* é uma medida de quão estendido ou localizado é um determinado estado, de modo que estados estendidos têm maiores P .

Observamos na Figura 11(b), que o *anticrossing* em destaque ocorre entre um estado inicialmente localizado da MB1, com menor P (curva cinza com pontos cheios) e um estado inicialmente estendido da MB2, com maior P (curva marrom com pontos abertos). Durante o *crossing*, os estados adquirem razões de participação comparáveis, trocando de caráter após o *crossing*. Em outras palavras, após o *crossing* o primeiro estado se torna estendido enquanto que o segundo se torna localizado.

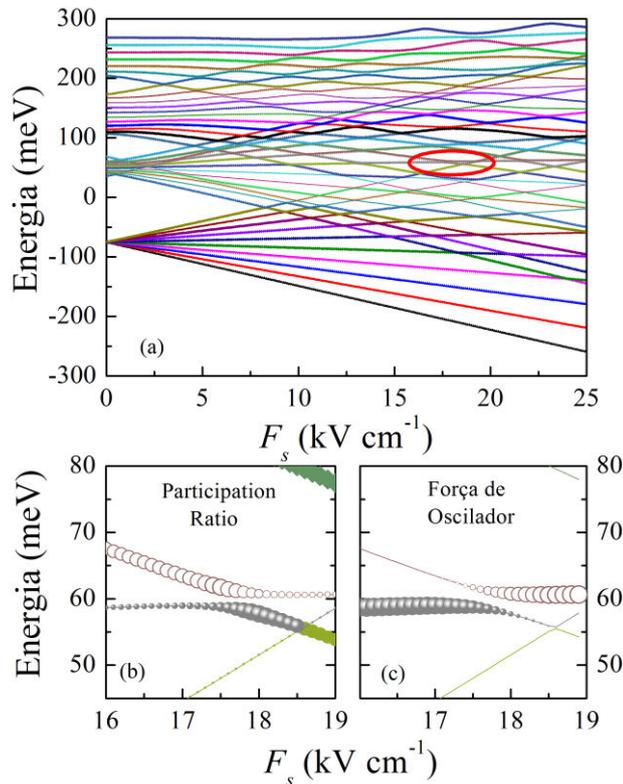


Figura 11 – (a) Espectro de energia em função do campo elétrico. (b) Ampliação da região destacada no espectro de energia, mostrando os *anticrossings* nos níveis. Os tamanhos dos pontos são proporcionais ao *participation ratio*, significando que quanto maior o ponto mais o estado é estendido. (c) O mesmo que em (b) com os pontos sendo proporcionais à força de oscilador.

Na Figura 11(c), os tamanhos pontos são proporcionais à força de oscilador entre o estado localizado no PQ e os estados das minibandas, definido como

$$f_{if} = \frac{2m^*}{\hbar^2} (E_i - E_f) |\langle \psi_i(x) | x | \psi_f(x) \rangle|^2, \quad \text{Eq. 25}$$

em que E_i e E_f , $\psi_i(x)$ e $\psi_f(x)$ são os autovalores e autofunções dos estados inicial e final da transição, respectivamente. Como podemos observar, comparando as Figuras 11(b) e (c), os estados localizados têm força de oscilador maior que a dos estados estendidos. No entanto na região do *anticrossing*, temos uma situação particular em que ambos os estados podem ser excitados. Nessa região, estados têm transições com forças de oscilador comparáveis além de

serem suficientemente estendidos (grande P), permitindo geração de fotocorrente. Portanto, nos *anticrossings*, a mistura entre os estados localizados da MB1 com os estados estendidos da MB2 dá origem aos aumentos na intensidade de fotocorrente vistos na Figura 10.

Como estamos tratando de transições ópticas entre estados em condição de *anticrossing*, tal fenômeno de aumento na fotocorrente pode estar relacionado ao problema de Landau-Zener-Stueckelberg-Majorana (LANDAU, 1932; ZENER, 1932; STUECKELBERG; MAJORANA, 1932). Nesse cenário, a troca no caráter de localização das funções de onda e da força de oscilador está associada à transição adiabática entre os estados que participam do *crossing*. Dessa forma, o elétron pode ser facilmente retirado da região das barreiras de filtro quando temos a presença da mistura entre estados localizados e estendidos, gerando picos nas curvas de fotocorrente em função do campo elétrico. Foram observadas características similares na curva de corrente-voltagem no caso de superredes semicondutoras, as quais foram relacionadas ao caráter ressonante do tunelamento nessas estruturas (ANDRONOV *et al.*, 2009; SIBILLE *et al.*, 1992).

Diferentemente dos trabalhos prévios, o efeito resultante da mistura entre os estados localizados e estendidos em nosso sistema, pode ser visto como uma condutância diferencial negativa, uma vez que temos a presença de diminuições na fotocorrente para regiões específicas de campo elétrico, independentemente de processos em que a diminuição na corrente é proveniente da retirada do sistema da condição de ressonância, como no caso dos diodos de tunelamento ressonante (GALETI *et al.*, 2013).

Finalmente, como nosso trabalho é baseado em um método para temperatura zero, para estimar efeitos de temperatura, utilizamos um fator de Boltzmann multiplicativo no cálculo da fotocorrente que nos dá indícios da influência da temperatura no sistema de PQM. Mesmo considerando que não consideramos efeitos de dopagem nas simulações, esta é a fonte de portadores de carga em um sistema real. O efeito de temperatura considerado aqui, deve-se apenas à redistribuição de tais portadores através dos níveis de energia. Dessa forma, a fotocorrente dependente da temperatura pode ser estimada por meio de

$$I(T) \propto \sum_{QW} e^{-\frac{E_{QW}}{k_B T}} I_{QW}, \quad \text{Eq. 29}$$

em que a soma leva em conta todos os poços quânticos, k_B é a constante de Boltzmann, T é a temperatura e I_{QW} é a fotocorrente do PQ. O estado ligado do 1° PQ, por ser o estado menos energético, é considerado como o zero de energia e as energias E_{QW} dos estados ligados dos demais poços são consideradas em relação à energia do 1° PQ.

A Figura 12(a) mostra os espectros de fotocorrente dados pela Eq. 29 para $T = 4$ K, em função da energia do campo oscilante, para campos elétricos variando de 1 a 46 kV cm^{-1} . Podemos notar que o comportamento da fotocorrente dependente do tempo é praticamente o mesmo daquele obtido para a fotocorrente do 1° PQ, mostrado na Figura 8(a). Isso pode ser entendido a partir do fator de ocupação exponencial adicionado à fotocorrente, que para baixas temperaturas tende a ser desprezível para estados com energias diferentes da energia do estado de referência, ou seja, o estado do 1° PQ.

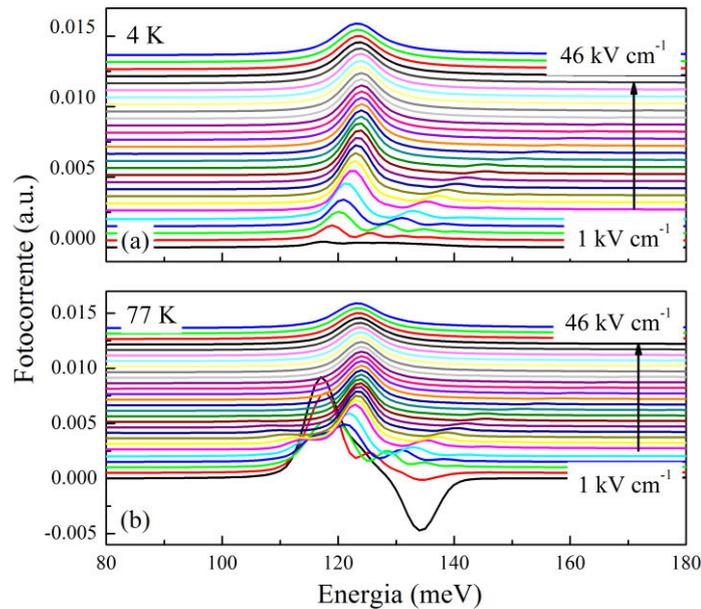


Figura 12 – Espectros de fotocorrente para vários valores de campo elétrico, usando o fator de Boltzmann para simular efeitos de temperatura para (a) 4 K e (b) 77 K.

Com o aumento da temperatura, os estados mais energéticos tendem a se tornar mais ocupados. A Figura 12(b) mostra os espectros de fotocorrente dependentes da temperatura para $T = 77$ K. Para pequenos valores de campo elétrico, os espectros são muito similares àqueles sem levar em conta a temperatura (Figura 7). Entretanto, com o aumento do campo elétrico, a mudança nas energias dos estados pela localização de Wannier-Stark aumenta o efeito do fator de Boltzmann sobre as curvas de corrente e o efeito de fotocondutância negativa apresentado anteriormente é perdido.

4.3. Conclusões

Em resumo, estudamos a influência de um campo elétrico externo sobre a fotocorrente gerada por uma heteroestrutura semicondutora formada de dez poços quânticos com barreiras

de filtro. De um modo geral, o pico principal da fotocorrente se mostra fracamente dependente do campo elétrico, isso porque tal pico é proveniente da transição entre o estado ligado de um poço quântico e seu respectivo estado na primeira minibanda, formada na região das barreiras de filtro. Observamos a presença de picos satélites fortemente dependentes do campo elétrico, os quais estão relacionados com as transições entre o estado ligado no PQ e os estados da primeira minibanda localizados nos PQ adjacentes. Estes picos apresentam intensidades fortemente dependentes do campo elétrico, devido ao *overlapping* espacial das funções de onda induzido pela localização de Wannier-Stark.

Mais importante, observamos a presença de uma fotocondutância diferencial negativa, isto é, uma diminuição da fotocorrente com o aumento o campo elétrico, cuja origem é atribuída à mistura entre estados localizados e estendidos na região do quase-contínuo de energias. Tal mistura se mostra muito sensível ao campo elétrico gerando *anticrossings* nos níveis de energia levando a transições do tipo Landau-Zener-Stuckelberg-Majorana. Alguns trabalhos na literatura mostraram experimentalmente resultados de velocidades diferenciais negativas em superredes na presença de campos elétricos. No entanto, as ressonâncias observadas foram atribuídas a processos de transição excitônica interbandas (SIBILLE *et al.*, 1992). Em contraste, os nossos cálculos sugerem a possibilidade de observação de uma fotocondutância diferencial negativa devida à mistura de estados eletrônicos localizados e estendidos na banda de condução, acessados via processos de transição intersubbandas.

Finalmente, a fim de simular os efeitos da temperatura calculamos a fotocorrente dos poços quânticos utilizando um fator de Boltzmann. Como esperado, obtemos que poços quânticos de menor energia se tornam cada vez mais importantes para o sinal de fotocorrente total quando a temperatura é reduzida. Acreditamos que esta forma simples de incluir um fator de ocupação do tipo fator de Boltzmann nos dá uma boa estimativa qualitativa do comportamento com a temperatura da fotocorrente nessas estruturas.

5. Geração e controle de fotocorrente polarizada em spin em heteroestruturas de GaMnAs²

A spintrônica é uma área da Física na qual um dos principais desafios é o desenvolvimento de dispositivos capazes de gerar corrente polarizada em spin de forma controlável (ZUTIC *et al.*, 2004). Recentemente, em um trabalho sobre correntes elétricas assistidas por laser em heteroestruturas contendo semicondutores magnéticos diluídos – DMS foram estudados os mecanismos que produzem polarização de spin e fotocorrentes induzidas pela irradiação de tais estruturas com luz de frequência na região do terahertz do espectro eletromagnético (OLBRICH *et al.*, 2012). Nesse mesmo trabalho, fotocorrentes polarizadas em spin, provenientes de estruturas de CdMnTe e InAlAs:Mn foram mostradas experimentalmente e argumentou-se a possibilidade de utilização dessas estruturas como dispositivos spintrônicos.

Em contrapartida, outros tipos de estruturas DMS baseadas em GaMnAs, também têm se mostrado potenciais candidatas para aplicações em dispositivos spintrônicos, devido principalmente aos avanços nas técnicas de crescimento, possibilitando aumentos significativos na quantidade de Mn substitucional e diminuição na quantidade de Mn intersticial incorporados na rede cristalina do GaAs (WANG *et al.*, 2013). Outro ponto a favor das estruturas de GaMnAs está baseado no amadurecimento do conhecimento relacionado às estruturas baseadas em GaAs.

No presente trabalho propomos duas heteroestruturas DMS baseadas em GaMnAs que permitem a geração de fotocorrente polarizada em spin, controlada através de um campo elétrico estático aplicado paralelamente à direção de crescimento da estrutura (BEZERRA *et al.*, 2014b). Esses sistemas são estudados sobre a ação de campo magnético e um campo elétrico oscilante cujo papel é simular a excitação com luz sobre a estrutura. Usando o método do *Split Operator*, descrito na seção 3 e detalhado no apêndice A, computamos as propriedades do estado fundamental e dos estados excitados, tais como suas energias e os acoplamentos entre tais estados (DEGANI *et al.*, 2010). E, graças aos designs especiais propostos para as estruturas, conseguimos o controle das forças de oscilador e das probabilidades de absorção por meio do campo elétrico aplicado. Consequentemente, a polarização de spin da fotocorrente pode ser controlada pela aplicação de um campo elétrico na estrutura.

² O texto desta seção foi desenvolvido seguindo de modo próximo o artigo de Bezerra *et al.* (2014b)

Nas próximas subseções apresentamos os detalhes das estruturas DMS sobre análise, interpretamos os resultados obtidos e tecemos algumas conclusões sobre o estudo.

5.1. Design das estruturas

As estruturas propostas para a geração de fotocorrente polarizada em spin estão esquematizadas nas Figuras 13 e 14. A primeira estrutura denominada PQS (Figura 13) consiste de um poço simples de $\text{Ga}_{0,91}\text{Mn}_{0,09}\text{As}$ (camada de DMS) de 23,2 nm de espessura colocado entre barreiras de $\text{Al}_{0,16}\text{Ga}_{0,84}\text{As}$ de 14 nm seguidas por contatos do mesmo material. Esse perfil de potencial fornece, na ausência de campo magnético, um PQ com 128 meV de profundidade. Foram adicionadas camadas de depleção de 10 nm de espessura, as quais são fundamentais no processo de controle da polarização de spin da fotocorrente, pelo campo elétrico. Nessas camadas, na presença de campo elétrico, temos a formação de um perfil do tipo barreira triangular, o qual assegura que os estados finais das transições responsáveis pela geração de fotocorrente sejam suficientemente estendidos, no entanto, preservando um bom *overlap* com o estado fundamental.

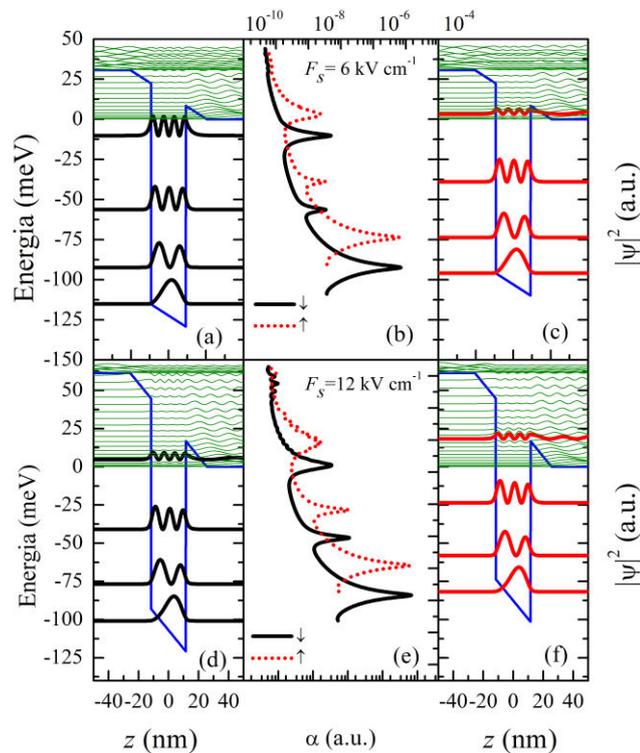


Figura 13 – Perfil de potencial da estrutura de PQ simples (PQS) para (a) a componente de spin \downarrow e para (c) a componente de spin \uparrow , para um campo elétrico estático de $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. (b) Espectro de absorção para o spin \downarrow (linha preta cheia) e para o spin \uparrow (linha vermelha pontilhada). (d) O mesmo que (a) para $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$. (e) O mesmo que (b) para $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$. O mesmo que (c) para $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$. As curvas pretas e vermelhas e verdes nos painéis (a), (c), (d) e (f) apresentam o módulo quadrado das funções de onda do sistema.

A segunda estrutura denominada PQD, está apresentada na Figura 14. Ela consiste de um PQ de 30 nm de espessura formado por duas camadas: uma camada de GaAs de 21 nm, adjacente a uma camada DMS de $\text{Ga}_{0,91}\text{Mn}_{0,09}\text{As}$ de 9 nm de espessura. Ao lado esquerdo do PQ, incluímos uma barreira larga de $\text{Al}_{0,19}\text{Ga}_{0,81}\text{As}$ formando um dos contatos elétricos, cujo objetivo é bloquear o fluxo de elétrons para o lado esquerdo da estrutura, produzindo uma corrente não nula inclusive na ausência de campo elétrico. Ao lado direito do PQ incluímos uma fina barreira de $\text{Al}_{0,19}\text{Ga}_{0,81}\text{As}$ de 3 nm, seguida por um larga camada de $\text{Al}_{0,15}\text{Ga}_{0,85}\text{As}$ (VURGAFTMAN *et al.*, 2001), funcionando como o outro contato elétrico. Para essa estrutura, também foram adicionadas camadas depleção, no entanto dados os valores de campo elétrico utilizados, seu papel não é fundamental no processo de controle da polarização de spin da fotocorrente.

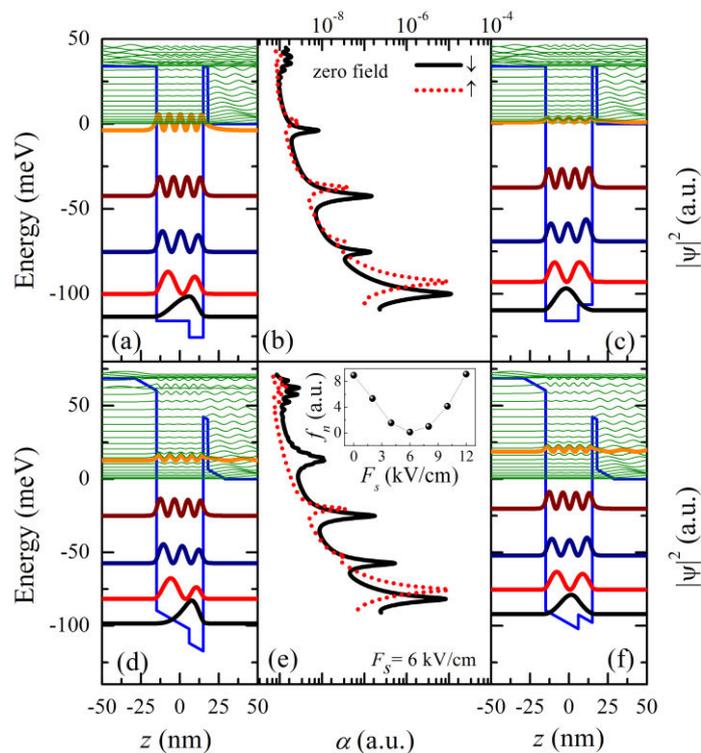


Figura 14 – Perfil de potencial da estrutura de PQ com duas camadas (PQD) para (a) a componente de spin \downarrow e para (c) a componente de spin \uparrow , sem campo elétrico estático. (b) Espectro de absorção para o spin \downarrow (linha preta cheia) e para o spin \uparrow (linha vermelha pontilhada). (d) O mesmo que (a) para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. (e) O mesmo que (b) para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. O mesmo que (c) para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. As curvas pretas e vermelhas e verdes nos painéis (a), (c), (d) e (f) apresentam o módulo quadrado das funções de onda do sistema. O *inset* no painel (e) apresenta a força de oscilador da transição entre o estado fundamental da componente spin \uparrow e o quinto estado.

Quando um campo magnético é aplicado ao longo do eixo perpendicular às camadas, ele causa uma separação na energia na camada DMS dependente de spin, conhecida como separação Zeeman gigante (*GZS na sigla em inglês*) (FURDYNA, 1988). A origem desse efeito, associado ao magnetismo da camada DMS, não é consensual (SAMARTH, 2012). Existem duas vertentes principais, a primeira delas associando o magnetismo no DMS a um

mar de Fermi de buracos itinerantes na banda de valência. Já a segunda e mais nova vertente associa o magnetismo no DMS a estados localizados de impureza na banda de condução. No presente trabalho adotamos a primeira vertente que tem sido reportada em muitos trabalhos experimentais, seguindo o trabalho de Furdyna (FURDYNA, 1988). Nesse modelo, a separação Zeeman é devida a uma interação $sp-d$ de troca mediada por buracos na banda de valência, entre os elétrons e os momentos locais das camadas d nos átomos de Mn (FURDYNA, 1988; MING *et al.*, 2011), originando um potencial efetivo dependente de spin (MICHEL *et al.*, 2007).

O Hamiltoniano dos sistemas na aproximação de massa efetiva para um elétron, na presença do campo elétrico estático com intensidade F_s e de um campo oscilante fazendo o papel da luz iluminando o sistema, com intensidade F_d e frequência ω , é então dado por

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V_\sigma(z) - ez(F_s - F_d \sin(\omega t)) + H_\parallel(x, y). \quad \text{Eq. 27}$$

Assumimos que $H_\parallel(x, y)$, que representa o Hamiltoniano do sistema no plano perpendicular à direção de crescimento, tem seus números quânticos correspondentes aos níveis de Landau conservados durante o processo de geração de corrente. $V_\sigma(z)$ é o potencial efetivo dependente de spin dado por (FURDYNA, 1988; MICHEL *et al.*, 2007)

$$V_\sigma(z) = V(z) + \frac{5}{3} N_0 \beta \sigma_x x_{eff} J B_J \left(\frac{2\mu_B B}{k_b(T+T_0)} \right), \quad \text{Eq. 28}$$

onde $B = 5$ T é a magnitude do campo magnético aplicado ao longo da direção de crescimento das estruturas. Esse é o valor de campo magnético em que, para os parâmetros de concentração e temperatura utilizados, a separação Zeeman é máxima, a partir desse valor temos uma saturação na função de Brillouin. $V(z)$ define o perfil de potencial na ausência de campos externos, $x_{eff} = 0,018$ é a concentração efetiva de Mn, $J = \frac{5}{2}$ é o spin dos íons de Mn e $\sigma_z = \pm \frac{1}{2}$ corresponde à componente spin-up ($\sigma = \uparrow$) e -down ($\sigma = \downarrow$), respectivamente. $N_0 \beta = -0,27$ eV é a constante da interação de troca $sp-d$, B_J é a função de Brillouin, μ_B é o magneton de Bohr, $T = 4$ K é a temperatura à qual as estruturas são submetidas e $T_0 = 12,5$ K determina a interação antiferromagnética entre íons Mn-Mn (MICHEL *et al.*, 2007; GANICHEV *et al.*, 2009).

5.2. Resultados e Discussão

Apresentamos nas Figuras 13 e 14 os módulos quadrados das funções de onda para cada uma das componentes de spin e, a partir desses estados, calculamos a probabilidade de absorção de um elétron inicialmente no estado fundamental para os estados excitados por meio da equação B. 16 (Apêndice B), a qual reescrevemos para explicitar as informações sobre o spin do elétron

$$\alpha_{\sigma}(E) = \sum_n \frac{f_{if}^{\sigma} \Gamma}{2\pi[(E-E_n^{\sigma})^2 + \frac{1}{4}\Gamma^2]}. \quad \text{Eq. 29}$$

$\Gamma = 2 \text{ meV}$ é a largura da Lorentziana ajustada para obter os resultados numéricos e leva em consideração efeitos de alargamento devidos á espalhamentos com fônons, elétrons, defeitos de interface, os quais não estão presentes no nosso modelo. f_{if}^{σ} é a força de oscilador entre o estado fundamental e o n -ésimo estado com mesmo spin $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow , definido como na equação B. 17 e reescrito aqui explicitando as informações sobre o spin

$$f_{if}^{\sigma} = \frac{2m^*}{\hbar^2} \Delta E_n^{\sigma} |\langle \psi_i^{\sigma}(x) | z | \psi_n^{\sigma}(x) \rangle|^2, \quad \text{Eq. 30}$$

com $\Delta E_n^{\sigma} = E_n^{\sigma} - E_1^{\sigma}$ sendo a separação em energia entre o n -ésimo estado $\psi_n^{\sigma}(x)$ e o estado fundamental $\psi_1^{\sigma}(x)$ com mesmo spin $\sigma = \uparrow$ ou \downarrow .

5.2.1. Poço quântico simples (PQS)

Iniciaremos com a apresentação dos resultados referentes à estrutura composta pelo poço quântico simples de GaMnAs, mostrada na Figura 13. Para essa estrutura, escolhemos a largura e a profundidade do PQ de modo a acomodar três estados ligados, incluindo o estado fundamental, e um quarto estado que depende da componente de spin. Para a componente de spin \downarrow , o quarto estado (E_4^{\downarrow}) pode ser ligado ou estendido dependendo do campo elétrico aplicado, como mostramos nas Figuras 13(a) e (d). Para a componente de spin \uparrow , o quarto estado (E_4^{\uparrow}) é sempre um estado de contínuo, independentemente do campo elétrico. Dessa

forma, a estrutura funciona como um QWIP (DEGANI *et al.*, 2011) dependente de spin, no qual um elétron pode ser excitado do estado fundamental de uma componente específica de spin para um estado excitado dessa mesma componente, que pode ser ligado ou estendido. É interessante notar que associando o controle sobre o E_4^\uparrow com esse comportamento do tipo QWIP, podemos selecionar a componente de spin que gerará fotocorrente por meio do campo elétrico.

Para investigar tais propriedades, é necessário calcular numericamente a origem física das transições envolvidas na geração de fotocorrente. Assim, antes de olharmos diretamente para a fotocorrente obtida em nossas simulações, voltamos nossa atenção ao espectro de absorção mostrado na Figura 13. O espectro de absorção para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$ é apresentado na Figura 13(b), para as duas componentes de spin, com os picos alinhados com o estado final da respectiva transição. Os picos correspondem a transições entre o estado fundamental e os estados excitados para a componente de spin \downarrow (curva preta sólida) e para a componente de spin \uparrow (curva vermelha pontilhada). Em particular vemos os picos correspondentes à absorção entre o estado fundamental de cada componente de spin e os estados $E_4^{\downarrow,\uparrow}$, responsáveis principais pela geração de corrente. Independentemente do campo aplicado, devido à assimetria causada pelo campo elétrico, o sistema não tem paridade definida com relação ao centro do PQ e as regras de seleção de paridade são relaxadas, de forma que todas as transições são possíveis.

Para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$ o estado E_4^\downarrow é ligado no PQ e, mesmo sendo a transição para tal estado permitida, não esperamos a geração de fotocorrente. Diferentemente do caso do estado E_4^\uparrow , que por ser um estado de contínuo esperamos que os elétrons nele excitados possam facilmente ser retirados da região de confinamento pelo campo elétrico, gerando fotocorrente. Portanto, para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$ esperamos obter apenas corrente proveniente da componente spin \uparrow .

Aumentando o campo elétrico para $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$, o estado E_4^\downarrow passa a ser um estado de contínuo assim como o estado E_4^\uparrow . Dessa forma, para esse campo elétrico esperamos obter fotocorrente proveniente das duas componentes de spin. Precisamos agora encontrar uma maneira de extinguir a fotocorrente proveniente da componente spin \uparrow , deixando apenas a corrente proveniente da componente spin \downarrow , alcançando assim o controle da polarização de spin da fotocorrente. Esse procedimento é descrito a seguir.

Na Tabela 1 apresentamos as energias dos estados fundamentais para a estrutura PQS e a diferença entre tais energias para cada uma das componentes de spin em função do campo elétrico. Como observamos, o GZS gera separações nas energias dos estados fundamentais

relativamente grandes, 14,3 meV e 19,2 meV para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$ e $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$, respectivamente. Por conta dessas diferenças de energia, a concentração dos elétrons com diferentes spins fica estatisticamente desequilibrada. Esquematizamos esse cenário na Figura 15. A região azul representa a ocupação da componente spin \downarrow , que é maior que a ocupação da componente spin \uparrow , representada pela região vermelha. Esperamos assim que a fotocorrente proveniente do sistema com esse tipo de desequilíbrio nas populações de spin também deva ser afetada (OLBRICH *et al.*, 2012), de modo que quanto mais próximo o nível de Fermi da separação de energia entre os estados fundamentais, menor a concentração de portadores com spin \uparrow relativamente aos portadores com spin \downarrow .

Para estimar quantitativamente a influência da ocupação de spin na fotocorrente, consideramos para o sistema PQS dois valores de concentração de elétrons na estrutura $n_{2D} = 0,7 \times 10^{12} \text{ cm}^{-2}$ e $n_{2D} = 1,1 \times 10^{13} \text{ cm}^{-2}$, que para dispersões parabólicas levam a níveis de Fermi de $E_F = 25 \text{ meV}$ e $E_F = 40 \text{ meV}$, respectivamente. Podemos estimar a concentração tridimensional de elétrons na estrutura utilizando a largura do PQ, obtendo $n_{3D} = 3,0 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$ e $n_{3D} = 4,9 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$, respectivamente, as quais são compatíveis com dopagens utilizadas em estruturas baseadas em GaAs (GALETI *et al.*, 2013).

Tabela 1 – Valores das energias do estado fundamental para as componentes de spin em função do campo elétrico aplicado. A diferença de energia entre os estados fundamentais é $|\Delta E_1^{\uparrow\downarrow}| = |E_1^\downarrow - E_1^\uparrow|$.

$F_s \text{ (kV cm}^{-1}\text{)}$	$E_1^\downarrow \text{ (meV)}$	$E_1^\uparrow \text{ (meV)}$	$ \Delta E_1^{\uparrow\downarrow} $
6	-110,3	-96,0	14,3
12	-101,0	-81,8	19,2

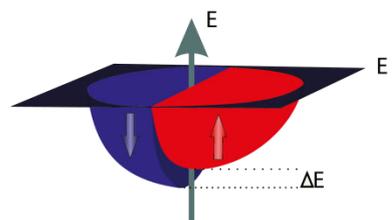


Figura 15 – Diagrama esquemático da ocupação de spin. A região em azul (em vermelho) representa a ocupação da componente spin \downarrow (\uparrow). ΔE é a diferença de energia entre os estados fundamentais das componentes de spin e E_F é a energia de Fermi.

Agora podemos determinar as ocupações relativas de cada componente de spin, as quais são apresentadas em função do campo elétrico na Tabela 2. Observamos que a contribuição da componente spin \uparrow para a fotocorrente é consideravelmente reduzida pelo fator de ocupação, independentemente do campo elétrico. Tais ocupações de spin foram

levadas em consideração na fotocorrente do sistema, cujos resultados estão apresentados na Figura 16.

Tabela 2 – Ocupação relativa das componentes de spin em função do campo elétrico

	$E_F = 25 \text{ meV}$		$E_F = 40 \text{ meV}$	
	[↓]	[↑]	[↓]	[↑]
6 kV cm^{-1}	78%	22%	67%	33%
12 kV cm^{-1}	88%	12%	74%	36%

As Figuras 16(a) e (c) mostram a fotocorrente para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$ e $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$, para $E_F = 25 \text{ meV}$, calculada a partir da Eq. 19. Como esperado, para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$ (Figura 17(a)), mesmo com apenas 22% de ocupação da componente de spin ↑, temos apenas um pico de fotocorrente em torno de 100 meV para tal componente. Aumentando o campo elétrico para $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$ (Figura 16(c)), a ocupação da componente de ↑ é ainda mais reduzida (12%), no entanto para esse valor de campo elétrico o estado E_4^\downarrow se torna um estado de contínuo e, como discutido anteriormente, temos a geração de fotocorrente proveniente da componente de spin ↓.

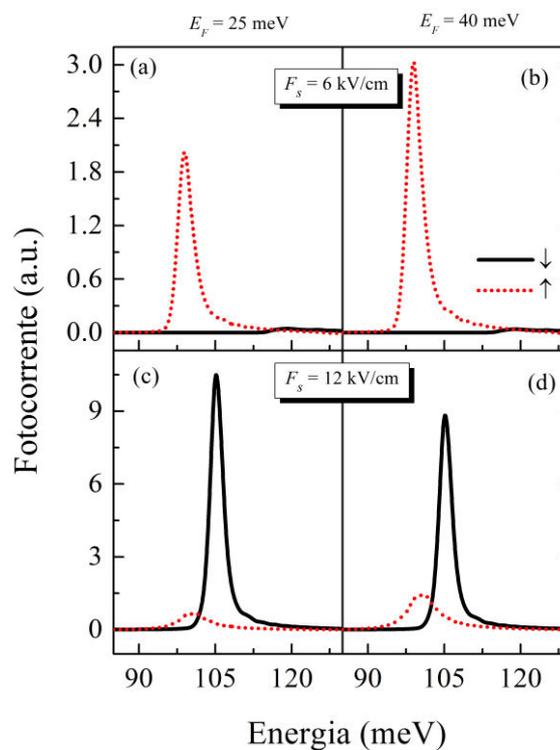


Figura 16 – Fotocorrente da estrutura PQS para as componentes de spin ↓ (linha preta cheia) e ↑ (linha vermelha pontilhada), para uma energia de Fermi de $E_F = 25 \text{ meV}$ para (a) $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$ e para (c) $F_s = 12 \text{ kV cm}^{-1}$. (b) O mesmo que (a) para $E_F = 40 \text{ meV}$. (d) O mesmo que (b) para $E_F = 40 \text{ meV}$.

Para a segunda concentração, cujos resultados são mostrados nas Figuras 16(b) e (d), a energia de Fermi ($E_F = 40$ meV) é maior, permitindo um aumento na ocupação da componente de spin \uparrow . Dessa forma, observamos um comportamento muito similar ao obtido para $E_F = 25$ meV, com um pequeno aumento na fotocorrente proveniente da componente de spin \uparrow .

Em resumo, manipulando o estado final da transição eletrônica, ligado ou estendido, e somando o efeito do desequilíbrio na ocupação de spin gerada pela presença da camada DMS no PQ, conseguimos obter uma fotocorrente proveniente da estrutura PQS polarizada em spin e controlada pelo campo elétrico aplicado à estrutura. No entanto, para isso precisamos nos preocupar com a concentração de portadores devido à dopagem do PQ, controlando o nível de Fermi. Para evitar esse tipo de problema propusemos uma segunda estrutura, a qual será apresentada na subseção seguinte.

5.2.2. Poço quântico com duas camadas (PQD)

A segunda estrutura proposta está esquematizada na Figura 14. Como descrevemos anteriormente, a camada DMS é colocada somente em parte do PQ e juntamente com parâmetros específicos de larguras das camadas do PQ, conseguimos diminuir consideravelmente a separação entre os estados fundamentais das componentes de spin. Para essa estrutura temos as seguintes diferenças entre as componentes de spin. Para a componente de spin \downarrow , existem no PQ quatro estados ligados e um quinto estado E_5^\downarrow que dependendo do campo elétrico aplicado pode ser tanto ligado quanto estendido, como mostrado nas Figuras 14(a) e (d). Para a componente de spin \uparrow , temos no PQ quatro estados ligados. No entanto o quinto estado E_5^\uparrow está no contínuo independentemente do campo elétrico (Figuras 14(c) e (f)). Assim, mais uma vez a estrutura é concebida para funcionar como um QWIP dependente de spin, onde a polarização de spin da fotocorrente pode ser controlada pelo campo elétrico.

A Figura 14(b) mostra a absorção para as duas componentes de spin, onde os picos correspondem à absorção entre o estado fundamental e os estados excitados da componente de spin \downarrow (curva preta sólida) e da componente de spin \uparrow (curva vermelha pontilhada). A principal transição responsável pela geração de fotocorrente ocorre entre o estado fundamental de cada uma das componentes de spin e os estados $E_5^{\uparrow,\downarrow}$. Na ausência de campo elétrico, mesmo essa transição específica sendo permitida para a componente de spin \downarrow , o estado E_5^\downarrow é ligado e localizado no PQ (Figura 14(a)). Assim, não esperamos a geração de fotocorrente para tal componente. É prevista apenas a geração de fotocorrente para esse

estado via processos de múltiplos fótons. Nesse caso, uma transição entre estados separados por certa energia E , pode ocorrer via processos não lineares nos quais o elétron pode ser excitado por n fótons com energias $\frac{E}{n}$, em estados intermediários reais ou virtuais. No entanto esse tipo de processo é reduzido para intensidades de excitação pequenas ($F_d = 1 \text{ kV cm}^{-1}$) (DEGANI *et al.*, 2011).

A transição do estado fundamental com spin \uparrow para o estado estendido E_5^\uparrow é permitida, gerando corrente. Dessa forma, esperamos apenas a geração de fotocorrente com polarização de spin \uparrow na ausência de campo elétrico.

Com o campo elétrico aumentado de $F_s = 0$ para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$, o estado E_5^\downarrow é arrastado para o contínuo como mostra a Figura 14(d), se tornando estendido. A transição entre o estado fundamental da componente de spin \downarrow e o estado E_5^\downarrow continua permitida, como mostra a persistência do pico em torno de 10 meV no espectro de absorção da componente de spin \downarrow (curva preta sólida na Figura 14(e)). Assim, alterando o campo elétrico de $F_s = 0$ para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$, a geração de polarização de spin \downarrow fotocorrente é alcançada. Por outro lado, esperamos que a polarização da componente de spin \uparrow seja reduzida pelas razões que serão apresentadas a seguir.

Embora o estado E_5^\uparrow esteja no contínuo para qualquer valor de campo elétrico, seu acoplamento com o estado fundamental da componente de spin \uparrow é reduzido. O *inset* da Figura 14(e) mostra a força de oscilador da transição entre o estado fundamental da componente de spin \uparrow e o estado E_5^\uparrow , f_{15}^\uparrow , que é claramente dependente do campo elétrico, apresentando um mínimo para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. Essa dependência da força de oscilador com o campo elétrico está diretamente relacionada com o design da estrutura, na qual a camada DMS foi colocada apenas em parte do PQ, e seu efeito sobre o estado fundamental da componente spin \uparrow . Devido às grandes alturas das barreiras de potencial em comparação com o GZS, as autofunções de menor energia do sistema podem ser vistas como estados de um poço de potencial simétrico finito, como mostrado na Figura 14(f). Assim tais autofunções podem ser interpretadas como tendo um caráter do tipo de paridade em relação ao centro do PQ. Ajustando o campo elétrico, esse caráter de paridade pode ser controlado para suprimir ou reforçar acoplamentos específicos entre os estados.

Em outras palavras, o elemento de matriz $\langle \psi_n^\uparrow | z | \psi_1^\uparrow \rangle$ é drasticamente reduzido (aumentado) para estados com a mesma (oposta) paridade. Esse é um efeito de ajuste, como visto no *inset* da Figura 14(e), onde o mínimo de f_{15}^\uparrow ocorre para campos elétricos nos quais os estados estão próximos de possuírem um caráter de paridade definido em relação ao centro do PQ. Em contraste, o estado fundamental da componente de spin \downarrow permanece sempre

localizado próximo à barreira do lado direito do PQ, como visto nas Figura 14(a) e (d) e a força de oscilador relacionada às transições da componente de spin \downarrow não é substancialmente afetada pela presença do campo elétrico, como pode ser visto no comportamento do espectro de absorção nas Figuras 15(b) e (e) (curvas pretas sólidas).

As respostas da fotocorrente são mostradas nas Figura 17(a) e (b), para $F_s = 0$ e $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. Observamos a presença de um pico de fotocorrente polarizado em spin para excitações em torno de 110 meV. Vemos também que essa polarização é controlada pelo campo elétrico, que pode reverter totalmente o tipo de spin transportado pela fotocorrente. Como esperado da análise feita previamente para os espectros de absorção, na ausência de campo temos a predominância da fotocorrente proveniente da componente de spin \uparrow (Figura 17(a)). Aumentando o campo para $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$, temos quase que exclusivamente fotocorrente proveniente da componente de spin \downarrow (Figura 17(b)).

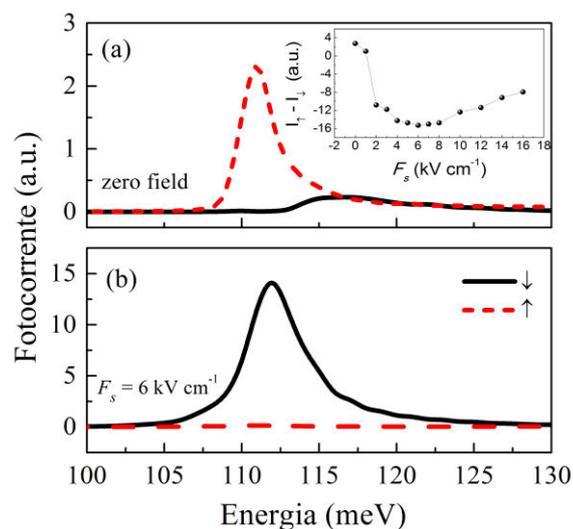


Figura 17 – Fotocorrente spin \downarrow (curva preta sólida) e spin \uparrow (curva vermelha pontilhada) (a) sem campo elétrico aplicado e para (b) $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$. O *inset* mostra a diferença entre as intensidades dos picos de fotocorrente para as componentes de spin \downarrow e spin \uparrow , em função do campo elétrico aplicado à estrutura.

O comportamento da fotocorrente para uma série de valores de campo elétrico é resumido no *inset* da Figura 17(a), mostrando a diferença entre as intensidades dos picos de fotocorrente para as componentes de spin \downarrow e spin \uparrow , em função do campo elétrico aplicado à estrutura. Na ausência de campo, temos o máximo de polarização com spin \uparrow . Com o aumento do campo, o estado E_5^\downarrow se torna um estado de contínuo aumentando a fotocorrente com spin \downarrow . Adicionalmente, a força de oscilador da componente de spin \uparrow diminui com o aumento do campo reduzindo a fotocorrente com spin \uparrow . Assim, até $F_s = 6 \text{ kV cm}^{-1}$, temos que a polarização de spin da fotocorrente é revertida, com uma transição relativamente abrupta entre

1 e 2 kV cm^{-1} , devido à transição do caráter ligado para contínuo do estado E_5^\downarrow . Para campos maiores, a força de oscilador da componente de spin \uparrow volta a aumentar e a polarização da fotocorrente passa a diminuir.

Para que tais efeitos ocorram, deve-se mencionar que os níveis de energia no PQ devem estar preenchidos, como no caso da estrutura PQS. Uma fonte para tais portadores pode ser, por exemplo, uma dopagem no PQ. Devido à presença do campo magnético, as componentes de spin \downarrow e spin \uparrow não são mais degeneradas e o estado de menor energia (spin \downarrow) pode se tornar estatisticamente mais ocupado. Essa população desequilibrada pode modificar de forma drástica os resultados que acabamos de apresentar, uma vez que podemos ter exponencialmente mais portadores de carga com um tipo de spin. Para minimizar esse efeito de ocupação, a estrutura PQD foi ajustada de modo que os estados fundamentais das duas componentes de spin tivessem energias próximas um da outra, abaixo do nível de Fermi, levando a populações de spin relativamente próximas.

Outra questão que deve ser levada em consideração ao trabalharmos com estruturas destinadas a aplicações em spintrônica são os processos de dissipação, que reduzem significativamente os comprimentos de difusão e os tempos de coerência nessas estruturas. Apesar disso, temos que o comprimento de difusão em estruturas baseadas em GaAs, pode superar distâncias de centenas de micrometros (KIKKAWA *et al.*, 1999), com tempos de descoerência excedendo os $200 \mu\text{m}$ na presença de campos elétricos externos (BLUHM *et al.*, 2011). Assim, usando estruturas baseadas em GaAs com tamanhos menores que esse tamanho de difusão como as estruturas propostas, esperamos uma pequena contribuição de processos de dissipação nas propriedades de transporte. Mesmo sabendo que processos de espalhamento podem ter papéis importantes em estruturas de GaMnAs, como mostrado por Olbrich e colaboradores (OLBRICH *et al.*, 2012), espalhamentos entre elétrons e os íons magnéticos geram e amplificam fotocorrente polarizadas em spin. Assim, esperamos que tais contribuições mantenham a polarização de spin da fotocorrente praticamente inalterada, apenas alargando os picos de corrente.

5.3. Conclusões

De maneira geral, mostramos nessa seção do trabalho a geração de corrente assistida por luz polarizada em spin e controlada pelo campo elétrico aplicado. Propomos duas estruturas, a primeira (PQS) composta por um poço simples de material DMS e a segunda (PQD) composta por um poço com duas camadas sendo uma destas camadas de material

DMS. Conseguimos a polarização de spin na PQS através do controle via campo elétrico do caráter localizado ou estendido do estado excitado da transição, o qual era responsável pela geração de corrente, e pelo desequilíbrio gerado pelas diferenças de energias entre os estados fundamentais dependentes de spin.

No caso da PQD, o caráter do estado excitado também foi utilizado, porém foi adicionado o controle sobre a força de oscilador das transições entre os estados fundamentais dependentes de spin e os estado excitados, devido a um caráter de paridade dependente do campo elétrico adquirido pelo estado fundamental de uma das componentes de spin. Para essa estrutura, devido ao seu design contendo a camada DMS apenas em parte do PQ, o *GZS* não levou a uma separação considerável entre os estados fundamentais das diferentes componentes de spin, excluindo a necessidade de levar em conta efeitos de ocupação, tornando esse sistema melhor controlável que o sistema PQS.

Concebemos tais heteroestruturas para serem sensíveis a fótons com energias na região do infravermelho do espectro eletromagnético ($\sim 11 \mu\text{m}$), oferecendo a possibilidade de atuarem com QWIP sensíveis ao spin. Mais ainda, o método que utilizamos para o controle da polarização de spin de estruturas de GaMnAs se estende a outros compostos da família III-V, como os nitretos (GaMnN), assim como para compostos da família II-VI como o ZnMnSe e o CdMnTe, gerando a possibilidade de operação para diferentes energias de excitação, como mostramos no Apêndice C.

6. Conclusões Gerais

Como apresentado anteriormente, no presente trabalho realizamos a modelagem de estruturas semicondutoras contendo poços quânticos para possíveis aplicações em optoeletrônica e em spintrônica. Analisamos dois tipos de sistemas, o primeiro sistema baseado em uma estrutura de poços quânticos múltiplos, acoplados ao um contínuo de estados modulados pela presença de barreiras de filtro; e o segundo sistema baseado em estruturas de poços quânticos contendo camadas de semicondutor magnético diluído.

Estudamos a fotocorrente proveniente da excitação da estrutura de PQM em função do campo elétrico aplicado à estrutura. Observamos o aparecimento de um pico principal de fotocorrente pouco dependente do campo elétrico para excitações com energias de cerca de 125 meV. Esse pico foi associado à transição entre os estados localizados nos PQ e seus respectivos estados na primeira minibanda formada na região das barreiras de filtro. Com a presença do campo elétrico, obtivemos a localização desses estados pela localização de Wannier-Stark e a formação de *Stark ladders*. Como o período tanto da estrutura de MPQ quanto da estrutura do tipo superrede formada na região das barreiras de filtro é o mesmo, a separação relativa entre os estados localizados nos PQ e seus respectivos estados na minibanda não muda significativamente com o campo elétrico, mantendo a posição do pico principal inalterada.

Observamos também a presença de picos satélites bastante sensíveis ao campo elétrico, cuja posição obedece à separação de energia gerada pela formação da *Stark Ladder*. Associamos esses picos foram associados às transições entre elétrons nos estados fundamentais dos poços e estados da minibanda relativos aos poços adjacentes. Com o aumento do campo, a localização espacial diminui o *overlap* entre esses estados, conseqüentemente diminuindo a fotocorrente proveniente de tal transição.

No regime de baixos campos, observamos a presença de picos de corrente negativa (contra o campo elétrico), os quais associamos ao caráter estendido dos estados finais das transições ópticas entre os estados dos poços quânticos do lado esquerdo da estrutura.

Ao olharmos para as curvas de corrente *versus* campo elétrico, observamos a presença de picos, gerando regiões de fotocondutância negativa. Esses picos atribuímos às misturas dos estados localizados e estendidos das minibandas na região do quase-contínuo de energias. Tal mistura se mostra muito sensível ao campo elétrico gerando *anticrossings* nos níveis de energia levando a transições do tipo Landau-Zener-Stuckelberg-Majorana.

Para o sistema com camadas DMS no PQ, propomos duas estruturas, a primeira com o PQ sendo a camada DMS e a segunda estrutura com apenas parte do PQ sendo composta

pela camada DMS. Observamos para a primeira estrutura a possibilidade de obtenção de fotocorrente polarizada em spin, controlada pelo campo elétrico. Alcançamos o controle da polarização de spin pela manipulação dependente de spin do estado final da transição óptica que gera a fotocorrente, associada à inclusão de fatores de ocupação determinados pela diferença de energia entre os estados fundamentais dependentes de spin, dada pelo *GZS*, na presença do campo magnético.

No caso da estrutura com a camada DMS em parte do PQ apenas, seu design especial elimina a necessidade de inclusão do fator de ocupação de spin e o controle sobre a polarização da fotocorrente é conseguido pela retomada de características de paridade, reduzindo drasticamente probabilidades de excitação específicas, controladas pelo campo elétrico.

Adicionalmente, como estamos tratando de possíveis fotodetectores, propomos um método de utilização do modelo de Levine para determinar a corrente de escuro da estrutura de PQM. Observamos que ao introduzirmos de forma completa a transmissão através da estrutura, conseguimos melhorar a precisão do método. Mais ainda, analisamos a corrente de escuro na presença e na ausência das barreiras de filtro, e observamos que essa corrente é consideravelmente reduzida ao adicionarmos tais barreiras, sendo esse um ponto bastante positivo em uma possível aplicação da estrutura como fotodetector.

No caso das estruturas contendo DMS, foi aplicado o mesmo esquema de polarização de spin da fotocorrente para estruturas da família II-VI, ZnMnSe. Conseguimos também uma polarização de spin significativa para tais estruturas, controlada pelo campo elétrico aplicado.

De modo geral, por meio dos métodos apresentados, conseguimos propor estruturas e mostrar características muito interessantes, as quais podem ser utilizadas posteriormente para a realização de dispositivos, por exemplo, fotodetectores de infravermelho ou até mesmo dispositivos spintrônicos.

REFERÊNCIAS

- ALTIN, E. et al. Barrier lowering effect and dark current characteristics in asymmetric GaAs/AlGaAs multi quantum well structure. **Applied Physics A**, v. 105, p. 833, 2011.
- ANDRONOV, A. A. et al. Transport in GaAs/Al_xGa_{1-x}As superlattices with narrow forbidden minibands: Low-frequency negative differential conductivity and current oscillations. **Semiconductors**, v. 43, p. 236, 2009.
- AOKI, H. Critical behaviour of extended states in disordered systems. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, v. 16, p. L205, 1982.
- BAIBICH, M. N. et al. Giant magnetoresistance of (001)Fe/(001)Cr magnetic superlattices. **Physical Review Letters**, v. 61, p. 2472, 1988.
- BASTARD, G. **Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures**. 1. ed. Paris: Wiley-Interscience, 1991.
- BELL, R. J. et al. Atomic vibrations in vitreous silica. **Discussions of Faraday Society**, v. 50, p. 55, 1970.
- BENIOFF, P. Quantum mechanical Hamilton models: Turing Machines. **International Journal of Theoretical Physics**, v. 21, p. 177, 1982.
- BEZERRA, A. T. et al. Negative photoconductance in a biased multiquantum well with filter barriers. **Physical Review B**, v. 89, p. 035301, 2014.
- BEZERRA, A. T. et al. Generation and control of spin-polarized photocurrents in GaMnAs heterostructures. **Applied Physics Letters**, v. 104, p. 022105, 2014b.
- BINASCH, G. et al. Enhanced magnetoresistance in layered magnetic structures with antiferromagnetic interlayer exchange. **Physical Review B**, v. 39, p. 4828, 1989.
- BLUHM, H. et al. Dephasing time of GaAs electron-spin qubits coupled to a nuclear bath exceeding 200 μ s. **Nature Physics**, v. 7, p. 109, 2011.
- BLÜMEL, R. Analytical solution of the finite quantum square-well problem. **Journal of Physics A: Mathematical and General**, v. 38, p. L673, 2005.
- CASAS, F. et al. Efficient computation of the Zassenhaus formula. **Computer Physics Communications**, v. 183, p. 2386, 2012.
- CASTELLANO, F. et al. Modelling of dark current in quantum well midinfrared photodetectors. **Physical Review B**, v. 79, p. 205304, 2009.
- COHEN-TANNOUDJI, C. et al. **Quantum Mechanics**. Paris: John Wiley & Sons, 1977.
- DEGANI, M. H. Stark ladders in strongly coupled GaAs-AlAs superlattices. **Applied Physics Letters**, v. 59, p. 57, 1991.
- DEGANI, M. H. et al. Numerical calculations of the quantum states in semiconductor nanostructures. **Journal of computational theory and nanoscience**, v. 7, p. 454, 2010.

- DEGANI, M. H. et al. Infrared photocurrent with one- and two-photon absorptions in a double-barrier quantum well system. **Journal of Applied Physics**, v. 110, p. 104313-104318, 2011.
- DEUSTCH, D. Quantum theory, the Church-Turing principle and the universal quantum computer. **Proceedings of the Royal Society of London A**, v. 400, p. 97, 1985.
- DIETL, T. A ten-year perspective on dilute magnetic semiconductors and oxides. **Nature Materials**, v. 9, p. 965, 2010.
- DINGLE, R. et al. Quantum states of confined carriers in very thin AlGaAs-GaAs-AlGaAs heterostructures. **Physical Review Letters**, v. 33, p. 827, 1974.
- DOBROWOLSKA, M. et al. Controlling the Curie temperature in (Ga,Mn)As through location of the Fermi level within the impurity band. **Nature Materials**, v. 11, p. 444, 2012.
- DONCHEV, V. et al. Dark current through GaAs/AlGaAs multiple quantum wells. **Semiconductor Science and Technology**, v. 621, n. 17, 2002.
- EDWARDS, J. T. et al. Numerical studies of localization in disordered systems. **Journal of Physics C: Solid State Physics**, v. 5, p. 1572, 1972.
- ETTEH, N. E. I. et al. Quantum mechanical scattering investigation of the thermionic and field induced emission components of the dark current in quantum well infrared photodetectors. **Journal Applied Physics**, v. 92, p. 248, 2002.
- FAIST, J. et al. High power mid-infrared ($\lambda \sim 5 \mu\text{m}$) quantum cascade lasers operating above room temperature. **Applied Physics Letters**, v. 68, p. 3680, 1996.
- FEYMANN, R. Simulating physics with computers. **International Journal of Theoretical Physics**, v. 21, p. 467, 1982.
- FURDYNA, J. K. Diluted magnetic semiconductors. **Journal of Applied Physics**, v. 64, p. R29, 1988.
- GALETI, H. V. A. et al. Optical and electrical control of spin polarization of two-dimensional hole gases in p-type resonant tunnelling devices. **Journal of Physics D: Applied Physics**, v. 46, p. 505313, 2013.
- GANICHEV, S. D. et al. Spin currents in diluted magnetic semiconductors. **Physical Review Letters**, v. 102, p. 156602, 2009.
- GENDRON, L. et al. Quantum cascade photodetector. **Applied Physics Letters**, v. 85, p. 2824, 2004.
- GMACHL, C. et al. High-power directional emission from microlasers with chaotic resonators. **Science**, v. 280, p. 1556, 1998.
- GOLOVACH, V. N. et al. Electric-dipole-induced spin resonance in quantum dots. **Physical Review B**, v. 74, p. 165319, 2006.
- GOOSSEN, K. W. et al. Grating enhanced quantum well detector. **Applied Physics Letters**, v. 1257, p. 47, 1985.
- HANBICKI, A. T. et al. Efficient electrical spin injection from a magnetic metal/tunnel barrier contact into a semiconductor. **Applied Physics Letters**, v. 80, p. 1240, 2002.

- HELM, M. The Basic Physics of Intersubband Transitions. In: LIU, H. C., et al. **Intersubband Transitions in Quantum Wells: Physics and Device Applications**. San Diego: Academic Press, v. 62, 2000. Cap. 1, p. 1.
- HINDS, S. et al. Near room-temperature mid-infrared quantum well photodetector. **Advanced Materials**, v. 23, p. 5536, 2011.
- HINO, K. et al. Zener resonance in a dynamic Wannier-Stark ladder: Two miniband model. **Physical Review B**, v. 71, p. 115325, 2005.
- HUANG, E. K. et al. Type-II superlattice dual-band LWIR imager with M-barrier and Fabry-Perot resonance. **Optics Letters**, v. 36, p. 2560, 2011.
- JAVONI, V. D. et al. Modelling and simulation of electronic and optical responses of quantum well infrared photodetectros (QWIPs). **Journal Physics D: Applied Physics**, v. 30, p. 1773.
- JOHNSON, M. et al. Interfacial charge-spin coupling: Injection and detection os spin magnetization in metals. **Physical Review Letters**, v. 55, p. 1790, 1985.
- KIKKAWA, J. M. et al. Lateral drag of spin coherence in gallium arsenide. **Nature**, v. 397, p. 139, 1999.
- KILEDJIAN, M. S. et al. Absorption in GaAs/Ga_{1-x}Al_xAs quantum wells with resonant barriers for improved responsivity. **Physical Review B**, v. 44, p. 5616, 1991.
- LANDAU, L. D. On the theory of transfer of energy at collisions II. **Physikalische Zeitschrift der Sowjetunion**, v. 2, p. 46, 1932.
- LEVINE, B. F. Quantum well infrared detectors. **Journal of Applied Physics**, v. 74, p. 8, 1993.
- LEVINE, B. F. et al. New 10 um infrared detector using intersubband absorption in resonant tunneling GaAlAs superlattices. **Applied Physics Letters**, v. 50, p. 1092, 1987.
- LHILLIER, E. et al. Ultimate performance of quantum well infrared photodetectors in the tunneling regime. **Infrared Physics & Technology**, v. 52, p. 132, 2009.
- LIU, H. C. et al. Dark current in quantum well infrared photodetectors. **Journal of Applied Physics**, v. 73, p. 2029, 1992.
- MAIALLE, M. Z. et al. Coherent population trapping in intersubband photocurrent spectra. **Physical Review B**, v. 83, p. 155308, 2011.
- MAJORAMA, E. Atomi orientati in campo magnetico variabile. **Nuovo Cimento**, v. 9, p. 43, 1932.
- MENDEZ, E. E. et al. Stark localization in GaAs-GaAlAs superlattices under an electric field. **Physical Review Letters**, v. 60, p. 2426, 1988.
- MICHEL, C. et al. Quantitative modeling of the annealing-induced changes of the magnetotransport in Ga_{1-x}Mn_xAs alloys. **Journal of Applied Physics**, v. 102, p. 073717, 2007.
- MING, Y. et al. Spin-polarized transport through ZnMnSe/ZnSe/ZnBeSe heterostructures. **Journal of Applied Physics**, v. 110, p. 093717, 2011.

MUNETTA, I. et al. Spin-dependent tunneling transport in a ferromagnetic GaMnAs and undoped GaAs double-quantum-well heterostructure. **Applied Physics Letters**, v. 100, p. 162409, 2012.

NOWAK, M. P. et al. Resonant harmonic generation and collective spin rotations in electrically driven quantum dots. **Physical Review B**, v. 86, p. 125428, 2012.

OHNO, H. et al. Magnetotransport properties of p-type (In, Mn)As diluted magnetic III-V semiconductors. **Physical Review Letters**, v. 68, p. 2664, 1992.

OHNO, Y. Energy dependence of localization length of two-dimensional electron system moving in a random potential under strong magnetic fields. **Journal of Physical Society of Japan**, v. 51, p. 2055, 1982.

OHNO, Y. et al. Electrical spin injection in a ferromagnetic semiconductor heterostructure. **Nature**, v. 402, p. 790, 2002.

OLBRICH, P. et al. Spin-polarized electric currents in diluted magnetic semiconductor heterostructures induced by terahertz and microwave radiation. **Physical Review B**, v. 86, p. 085310, 2012.

PEI, F. et al. Valley–spin blockade and spin resonance in carbon nanotubes. **Nature Nanotechnology**, v. 7, p. 630, 2012.

RIBEIRO, H. et al. Interplay of charge and spin coherence in Landau-Zener-Stückelberg-Majorana interferometry. **Physical Review B**, v. 87, p. 235318, 2013.

ROGALSKI, A. Infrared detectors: an overview. **Infrared Physics & Technology**, v. 43, p. 187, 2002.

ROSAM, B. et al. Field-induced delocalization and zener breakdown in semiconductor superlattices. **Physical Review Letters**, v. 86, p. 1307, 2001.

SAMARTH, N. Ferromagnetic Semiconductors: Battle of Bands. **Nature Materials**, v. 11, p. 360, 2012.

SATO, K. et al. First-principles theory of dilute magnetic semiconductors. **Reviews of Modern Physics**, v. 82, p. 1633, 2010.

SCHNEIDER, H. Optimized performance of quantum well intersubband infrared detectors: Photovoltaic versus photoconductive operation. **Journal of Applied Physics**, v. 74, p. 4789, 1993.

SCHNEIDER, H. et al. Photovoltaic quantum well infrared photodetectors: The four-zone scheme. **Applied Physics Letters**, v. 71, p. 246, 1997.

SCHNEIDER, H. et al. **Quantum well infrared photodetectors: Physics and applications**. Berlin: Springer, 2007.

SHEVCHENKO, S. N. et al. Landau-Zener-Stückelberg interferometry. **Physics Reports**, v. 492, p. 1, 2010.

SHIN, H. et al. Efficient Evaluation of absorption coefficients for biased quantumwell infrared photodetectors. **Journal Korean Physics Society**, v. 59, p. 150, 2011.

- SIBILLE, A. et al. Coexistence of Wannier–Stark localization and negative differential velocity in superlattices. **Applied Physics Letters**, v. 60, p. 457, 1992.
- SIRTORI, C. et al. Photocurrent reversal induced by localized continuum resonances in asymmetric quantum semiconductor structures. **Applied Physics Letters**, v. 63, p. 2670, 1993.
- STORY, T. et al. Carrier-concentration-induced ferromagnetism in PbSnMnTe. **Physical Review Letters**, v. 56, p. 777, 1986.
- STUECKELBERG, E. C. G. Theory of inelastic collisions between atoms. **Helvetica Physica Acta**, v. 5, p. 39.
- TOLEDO PIZA, A. F. R. **Mecânica Quântica**. 2ª. ed. São Paulo: Edusp, 2001.
- TRINITÉ, V. et al. Modelling of electronic transporte in quantum well infrared photodetectors. **Infrared Physics Technology**, v. 54, p. 204, 2011.
- VIBÓK, A. et al. Parametrization of complex absorbing potentials for time-dependent quantum dynamics. **Journal of Physical Chemistry**, v. 96, p. 8712, 1996.
- VURGAFTMAN, I. et al. Band parameters of III-V compound semiconductors and their alloys. **Journal of Applied Physics**, v. 89, p. 5815, 2001.
- WALDOMIRO-PASCHOAL, J. et al. Hopping Conduction in Mn Ion-Implanted GaAs Nanowires. **Nano Letters**, v. 12, p. 4838, 2012.
- WANG, M. et al. High Curie temperatures at low compensation in the ferromagnetic semiconductor (Ga,Mn)As. **Physical Review B**, v. 87, p. 121301(R), 2013.
- YAMAMOTO, M. et al. Electrical control of solid state flying qubit. **Nature Nanotechnology**, v. 7, p. 247, 2012.
- ZENER, C. Non-Adiabatic Crossing of Energy Levels. **Proceedings of the Royal Society A**, v. 137, p. 696, 1932.
- ZUTIC, I. et al. Spintronics: Fundamentals and applications. **Review of Modern Physics**, v. 76, p. 323, 2004.

APÊNDICE A

Método do *Split Operator*

Nesse apêndice descrevemos em detalhes o método utilizado para a simulação numérica dos resultados apresentados nesse trabalho.

Segundo a descrição de Heisenberg, a evolução temporal de um observável $g(t)$ de um sistema quântico é definida através de um operador hermiteano H dada por (TOLEDO PIZA, 2001)

$$i\hbar \frac{dg(t)}{dt} = [g(t), H], \quad \text{A. 1}$$

onde \hbar é a constante de Planck reduzida e $[g(t), H]$ é o comutador entre os operadores $g(t)$ e H . Supondo que H não dependa explicitamente do tempo, a A. 1 pode ser resolvida como

$$g(t) = e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} g(t_0) e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}, \quad \text{A. 2}$$

de forma que $U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}$ é o operador de evolução temporal. Ao fazer uma analogia direta com as equações de Hamilton na mecânica clássica observamos que o operador H , que aparece na exponencial do operador de evolução temporal, é nada mais do que o Hamiltoniano do sistema, que por ser hermiteano, garante que $U(t, t_0)$ seja um operador unitário.

Na representação de Schrödinger, se nós conhecemos o estado do sistema em um determinado instante é possível evoluí-lo até um tempo qualquer por meio do operador de evolução temporal, por um incremento de tempo $\Delta t = t - t_0$, como

$$\psi(z, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t} \psi(z, t_0). \quad \text{A. 3}$$

O Hamiltoniano $H = T + V$ é dado pela soma dos operadores de energia cinética $T = \hat{P}^2/2m^*$ e potencial V . m^* é a massa efetiva do elétron na heteroestrutura semicondutora. Para expressar a exponencial da soma de operadores na A. 3 utilizamos a expressão de Zassenhaus (CASAS *et al.*, 2012)

$$e^{t(A+B)} = e^{tA} e^{tB} e^{-\frac{t^2}{2}[A,B]} e^{-\frac{t^3}{3}(2[B,[A,B]]+[A,[A,B]])} \dots \quad \text{A. 4}$$

Caso os operadores A e B comutem, é direto notar que a exponencial da soma dos operadores é dada pelo produto das exponenciais desses operadores, como no caso de exponenciais de escalares. No entanto, os operadores T e V não comutam e a exponencial não pode ser realizada exatamente e algumas aproximações devem ser utilizadas.

Aqui utilizaremos o chamado método do *Split Operator*, em que o Hamiltoniano é quebrado como a soma dos operadores e, pela A. 4, vemos que

$$e^{-i(T+V)\Delta t/\hbar} = e^{-iV\Delta t/\hbar} e^{-iT\Delta t/\hbar} + O(\Delta t^2), \quad \text{A. 5}$$

onde $O(\Delta t^2)$, significa um erro na ordem do quadrado de Δt . Para diminuir ainda mais a ordem do erro, podemos mostrar que quebrar o Hamiltoniano escrito como $H = \frac{V}{2} + T + \frac{V}{2}$, leva a (DEGANI *et al.*, 2010)

$$e^{-iH\Delta t/\hbar} = e^{-iV\Delta t/2\hbar} e^{-iT\Delta t/\hbar} e^{-iV\Delta t/2\hbar} + O(\Delta t^3). \quad \text{A. 6}$$

Assim, o erro na aproximação da exponencial fica da ordem de Δt^3 , que pode ser arbitrário. O interessante é notar que as aproximações mostradas ainda constituem operações unitárias, garantindo conservação de probabilidade e assegurando a estabilidade do método.

A partir da A. 5, podemos voltar à evolução temporal dada pela A. 3, que fica reescrita como

$$\psi(z, \Delta t) \approx e^{-iV\Delta t/2\hbar} e^{-iT\Delta t/\hbar} e^{-iV\Delta t/2\hbar} \psi(z, 0). \quad \text{A. 7}$$

Primeiramente, descrevemos numericamente o potencial e a função de onda por pontos em uma grade que pode ser uniformemente espaçada ou não. Com o potencial descrito podemos aplicar a primeira exponencial na função de onda inicial, unicamente multiplicando a função de onda pela exponencial em cada ponto da grade

$$\xi(z, \Delta t) = e^{-\frac{iV\Delta t}{2\hbar}} \psi(z, 0). \quad \text{A. 8}$$

O próximo passo é a aplicação da exponencial contendo o operador de energia cinética. Esse não é um procedimento tão trivial quanto a obtenção de $\xi(z, \Delta t)$, uma vez que o operador energia cinética em sua representação espacial apresenta derivadas $T = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$. Para resolver essa dificuldade podemos, em sistemas periódicos, aplicar transformadas de Fourier (FFT), uma vez que no espaço recíproco T é diagonal e sua atuação na função de onda se dá de forma equivalente à aplicação de V no espaço real. Nesse caso

$$\bar{\xi}(k, \Delta t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ikz} \xi(z, \Delta t) dz \quad \text{A. 9}$$

onde $\bar{\xi}(k, \Delta t)$ é a função de onda transformada. Assim, basta multiplicar

$$\eta(k, \Delta t) = e^{-\frac{ik^2 \Delta t}{2\hbar m^*}} \bar{\xi}(k, \Delta t). \quad \text{A. 10}$$

Aplicando a transformada de Fourier inversa temos a evolução

$$\eta(z, \Delta t) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikz} \eta(k, \Delta t). \quad \text{A. 11}$$

Finalmente, para completar a evolução, basta repetir a multiplicação por $e^{-\frac{iV\Delta t}{2\hbar}}$, assim

$$\psi(z, \Delta t) = e^{-\frac{iV\Delta t}{2\hbar}} \eta(z, \Delta t). \quad \text{A. 12}$$

Esse esquema é então repetido e a evolução temporal é obtida. Como mencionado anteriormente, a utilização da FFT restringe-se principalmente à utilização de sistemas simétricos e periódicos, mas observamos que esta pode também ser utilizada para sistemas em que a parte ativa do potencial é pequena com relação ao tamanho total do sistema. Assim podemos nos valer da rapidez da FFT mesmo para casos em que temos a aplicação de campos externos no sistema.

Mesmo assim, para situações em que a simetria do potencial é perdida pela aplicação de campos externos, ou mesmo para potenciais sem simetria, podemos utilizar outra aproximação, a qual descrevemos a seguir (DEGANI *et al.*, 2010).

Fazendo $\kappa = -ip^2/2\hbar m^*$, podemos expandir a exponencial do operador T em série de Taylor em função de Δt como

$$e^{\kappa\Delta} = 1 + \kappa\Delta t + \frac{(\kappa\Delta t)^2}{2!} + \frac{(\kappa\Delta t)^3}{3!} + \dots \quad \text{A. 13}$$

Rearranjando os termos adequadamente e truncando a soma na mesma ordem do erro obtido pelo *Split Operator*, temos

$$e^{\kappa\Delta} = \left(1 + \frac{\kappa\Delta t}{2} + \frac{(\kappa\Delta t)^2}{4} + O(\Delta t^3)\right) \cdot \left(1 + \frac{\kappa\Delta t}{2}\right) \quad \text{A. 14}$$

O primeiro termo do lado direito da A. 14 pode ser aproximado como a soma de uma série geométrica de razão $\frac{\kappa\Delta t}{2}$ e a expansão da exponencial fica (DEGANI *et al.*, 2010)

$$e^{\kappa\Delta} = \left(1 - \frac{\kappa\Delta t}{2}\right)^{-1} \cdot \left(1 + \frac{\kappa\Delta t}{2}\right). \quad \text{A. 15}$$

Dessa forma,

$$\eta(z, \Delta t) = \left(1 + \frac{ip^2\Delta t}{4\hbar m^*}\right)^{-1} \left(1 - \frac{ip^2\Delta t}{4\hbar m^*}\right) \xi(z, \Delta t). \quad \text{A. 16}$$

De modo que

$$\left(1 + \frac{ip^2\Delta t}{4\hbar m^*}\right) \eta(z, \Delta t) = \left(1 - \frac{ip^2\Delta t}{4\hbar m^*}\right) \xi(z, \Delta t). \quad \text{A. 17}$$

Podemos agora escrever o operador energia cinética como derivadas numéricas, levando a

$$\eta_j - \beta(\eta_{j-1} - 2\eta_j + \eta_{j+1}) = \xi_j - \beta(\xi_{j-1} - 2\xi_j + \xi_{j+1}), \quad \text{A. 18}$$

onde $\eta_j = \eta(z_j)$, $\xi_j = \xi(z_j)$, $\beta = -i\hbar\Delta t/4m^*\delta^2$ e δ a distância entre dois pontos consecutivos da grade.

Reorganizando os termos temos

$$-\beta\eta_{j-1} + \eta_j(1 + 2\beta) - \beta\eta_{j+1} = \beta\xi_{j-1} + (1 - \beta)\xi_j - \beta\xi_{j+1}. \quad \text{A. 19}$$

A A. 19 determina um sistema de equações representado na forma de uma matriz tridiagonal. Com o lado direito da equação totalmente determinado, para obter $\eta(z, \Delta t)$, basta resolver o sistema de equações.

Explicitamente, para um sistema com condições de contorno infinitas, no qual a função de onda deve ser nula nas bordas ($\eta_0 = \eta_{n+1} = 0$), temos

$$\begin{pmatrix} a & -\beta & 0 & 0 \\ -\beta & a & -\beta & 0 \\ 0 & -\beta & a & -\beta \\ 0 & 0 & -\beta & a \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \eta_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & \beta & 0 & 0 \\ \beta & c & \beta & 0 \\ 0 & \beta & c & \beta \\ 0 & 0 & \beta & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ \xi_n \end{pmatrix} \quad \text{A. 20}$$

onde $a = 1 + 2\beta$ e $c = 1 - 2\beta$.

Assim como no caso da solução via FFT, após obter $\eta(z, \Delta t)$, a função de onda $\psi(z, \Delta t)$ evoluída de Δt é calculada como na A. 8. Repetindo esse procedimento uma função de onda inicial $\psi(z, 0)$ é evoluída para $\psi(z, t)$.

a. Autofunções

Na maioria das vezes é importante conhecer não somente as funções de onda do sistema evoluídas no tempo, mas também as autofunções dos estados estacionários da estrutura. Consideremos que a equação de Schrödinger unidimensional dependente do tempo seja dada por

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle, \quad \text{A. 21}$$

onde $|\psi(t)\rangle = \langle z|\psi\rangle$. Para resolver tal equação, podemos considerar o sistema em seu estado estacionário e realizar uma separação de variáveis $|\psi(t)\rangle = |\phi\rangle \otimes |\chi(t)\rangle$, de modo que a A. 21 assume a forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\chi(t)\rangle = H|\phi\rangle = E|\phi\rangle \otimes |\chi(t)\rangle, \quad \text{A. 22}$$

onde E é uma constante relacionada com a energia do sistema. Com isso obtemos duas equações, uma espacial $H|\phi_E\rangle = E|\phi_E\rangle$, também conhecida como equação de Schrödinger

independente do tempo e uma equação temporal $\frac{\partial}{\partial t}|\chi(t)\rangle = \frac{iE}{\hbar}|\chi(t)\rangle$. Essa última tem solução dada por $\chi(t) = \chi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}Et}$, onde χ_0 é a normalização da parte temporal da função de onda. A função de onda completa passa a ser $|\psi(t)\rangle = \chi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}Et}|\phi_E\rangle$.

Considerando agora um conjunto de funções de onda ortonormais $|\phi_l\rangle$ formando uma base completa, sabemos que a função de onda $|\phi_E\rangle$ pode ser escrita como uma combinação linear de tais funções de onda como $|\phi_E\rangle = \sum_l b_l |\phi_l\rangle$. Dessa forma, a função de onda dependente do tempo $|\psi(t)\rangle$ fica

$$|\psi(t)\rangle = \sum_l a_l e^{-\frac{i}{\hbar}E_l t} |\phi_l\rangle, \quad \text{A. 23}$$

Onde $a_l = b_l \chi_0$ são os coeficientes da expansão. Multiplicando $|\psi(t)\rangle$ por $e^{\frac{i}{\hbar}E_n t}$ e integrando no tempo, obtemos

$$\int_0^\infty |\psi(t)\rangle e^{\frac{i}{\hbar}E_n t} dt = \int_0^\infty \sum_l a_l e^{-\frac{i}{\hbar}(E_l - E_n)t} |\phi_l\rangle dt. \quad \text{A. 24}$$

Como tanto os coeficientes a_l quanto as funções $|\phi_l\rangle$ são dependentes exclusivamente de z , podemos alterar a ordem da integração restando apenas uma integral da exponencial cujo resultado é proporcional a uma função delta de Dirac $\delta(E_l - E_n)$. Assim temos

$$\int_0^\infty |\psi(t)\rangle e^{\frac{i}{\hbar}E_n t} dt = \pi \hbar \sum_l a_l |\phi_l\rangle \delta(E_l - E_n) \approx |\phi_n\rangle \quad \text{A. 25}$$

Com isso, a partir da integração da função de onda obtida pela evolução temporal e a energia dos estados que se deseja encontrar, E_n , é possível determinarmos as funções de onda dos estados estacionários. É importante salientar que no método não utilizamos nenhuma expansão em base, este artifício foi apenas utilizado para demonstrar a possibilidade de encontrarmos os estados estacionários do potencial em questão utilizando a evolução temporal dada pelo método.

Existe uma segunda maneira de encontrarmos simultaneamente as autofunções e suas respectivas autoenergias, para isso basta realizar a evolução temporal descrita anteriormente pelo método *Split Operator*, fazendo a substituição $t \rightarrow i\tau$, ou seja, realizando uma evolução em tempo imaginário (DEGANI *et al.*, 2010; DEGANI *et al.*, 2011).

Consideremos um Hamiltoniano dependente do tempo cujas autofunções e autoenergias sejam $|\phi_l\rangle$ e ϵ_l , respectivamente. O estado $|\psi(t)\rangle$ pode ser escrito como na A. 23. Fazendo a substituição $t \rightarrow i\tau$ e normalizando, temos

$$|\psi(t)\rangle^{norm} = \frac{\sum_l a_l e^{-\frac{E_l \tau}{\hbar}} |\phi_l\rangle}{\sqrt{\sum_l |a_l|^2 e^{-2\frac{E_l \tau}{\hbar}}}}. \quad \text{A. 26}$$

Podemos notar que a normalização depende de τ , assim esta deve ser realizada a cada passo de tempo. Reescrevendo a A. 26, separando o primeiro termo da soma,

$$|\psi(t)\rangle^{norm} = \frac{|\phi_l\rangle + \sum_{l>0} a_l e^{-\frac{(E_l - E_0)\tau}{\hbar}} |\phi_l\rangle}{\sqrt{1 + \sum_l \left|\frac{a_l}{a_0}\right|^2 e^{-2\frac{(E_l - E_0)\tau}{\hbar}}}}. \quad \text{A. 27}$$

Como $E_l > E_0$, no limite de $\tau \rightarrow \infty$ temos

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} |\psi(t)\rangle^{norm} = |\phi_l\rangle. \quad \text{A. 28}$$

Observamos que a evolução em tempo imaginário leva ao autoestado do sistema, desde que a normalização seja feita a cada passo de tempo e que a evolução seja feita até que autoenergia desse estado convirja. Os estados excitados são obtidos pela evolução temporal de demais estados iniciais, os quais são ortonormalizados entre si a cada passo de tempo pelo método de Gram-Schmidt.

b. Autoenergias

A maneira mais simples de calcularmos as autoenergias conhecendo os autoestados $|\phi_l\rangle$ obtidos pela evolução em tempo imaginário, é através da média do Hamiltoniano do sistema,

$$E = \langle \phi | H | \phi \rangle. \quad \text{A. 29}$$

Temos especificamente que a energia potencial é dada por $E_{pot} = \langle \phi | V | \phi \rangle$. Como estamos tratando de um problema discreto, a integral é escrita como uma soma

$$E_{pot} = \sum_j \phi_j^\dagger V_j \phi_j \delta \quad \text{A. 30}$$

onde $V_j = V(x_j)$, e ϕ_j^\dagger é o complexo conjugado de ϕ_j . Analogamente, a energia cinética é obtida como

$$E_{cin} = \sum_j \phi_j^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m^* \delta^2} (\phi_{j-1} - 2\phi_j + \phi_{j+1}) \right) \delta \quad \text{A. 31}$$

onde a segunda derivada da função de onda $|\phi\rangle$ foi discretizada nos pontos da grade.

Uma segunda maneira de obtermos as autoenergias é através da correlação temporal da função de onda evoluída em tempo real (escrita como na A. 23) com a função de onda inicial

$$\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \sum_{l,n} a_l^\dagger a_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} \langle \phi_l | \phi_n \rangle dz. \quad \text{A. 32}$$

Considerando a ortonormalidade das funções $\langle \phi_l | \phi_n \rangle = \delta_{l,n}$, a A. 32 assume a forma

$$\langle \psi(0) | \psi(t) \rangle = \sum_n |a_n|^2 e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t}. \quad \text{A. 33}$$

Tomando a transformada de Fourier dessa função de correlação temporal e rearranjando a ordem entre a integral e a soma, temos

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle e^{i\omega t} dt = \sum_n |a_n|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t} e^{-\frac{i}{\hbar} E_n t} dt, \quad \text{A. 34}$$

onde ω é uma frequência. A integral do lado direito da equação é facilmente reconhecida como uma função delta de Dirac $\delta(\omega - E_n/\hbar)$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle \psi(0) | \psi(t) \rangle e^{i\omega t} dt = 2\pi \sum_n |a_n|^2 \delta\left(\omega - \frac{E_n}{\hbar}\right). \quad \text{A. 35}$$

Sendo assim, conhecendo as funções de onda inicial e a função de onda evoluída no tempo variando a frequência ω , que determina as energias dos estados localizados, é possível determinarmos as autoenergias do sistema.

APÊNDICE B

B.1. Fotocorrente

Para calcularmos a corrente através de estados quânticos, utilizamos a conservação de probabilidade inerente da equação de Schrödinger (COHEN-TANNOUDDJI *et al.*, 1977). Para tanto, observamos que sendo Hamiltoniano do sistema hermiteano e o quadrado da norma do vetor de estado independente do tempo, a variação temporal do quadrado dessa norma pode ser escrita como (TOLEDO PIZA, 2001)

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = \left[\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \right] | \psi(t) \rangle + \langle \psi(t) | \left[\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle \right]. \quad \text{B. 1}$$

Utilizando a equação de Schrödinger, temos que $\frac{d}{dt} | \psi(t) \rangle = \frac{1}{i\hbar} H | \psi(t) \rangle$. O complexo conjugado da forma dependente do tempo da equação é $\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi(t) | H^\dagger$. Dada a hermiticidade do operador Hamiltoniano, concluímos que

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle = 0. \quad \text{B. 2}$$

Ou seja, a evolução temporal não modifica a probabilidade. Assim, $|\psi(\vec{r}, t)|^2$ pode ser interpretado como uma densidade de probabilidade. Considerando $|\psi(t)\rangle$ normalizado e definindo a densidade de probabilidade $\rho(\vec{r}, t) = |\psi(\vec{r}, t)|^2$, a probabilidade de encontrar uma partícula localizada num ponto no volume infinitesimal $d\vec{r}$ em um dado instante de tempo t é

$$d\mathcal{P}(\vec{r}, t) = \rho(\vec{r}, t) d\vec{r}. \quad \text{B. 3}$$

Mesmo mostrando que a densidade de probabilidade permanece constante no tempo, isso não significa que $\rho(\vec{r}, t)$ deve ser independente de t em cada ponto \vec{r} . Assumindo que a partícula sobre análise esteja sujeita a um potencial escalar $V(\vec{r}, t)$, a equação de Schrödinger na representação espacial assume a forma

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi(t) \rangle = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 | \psi(t) \rangle + V(\vec{r}, t) | \psi(t) \rangle. \quad \text{B. 4}$$

O complexo conjugado da B. 4 é

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle \psi(t) | = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \langle \psi(t) | \nabla^2 \dagger + \langle \psi(t) | V(\vec{x}, t) \quad \text{B. 5}$$

Multiplicando a B. 4 por $\langle \psi(t) |$ e a B. 5 por $|\psi(t)\rangle$, subtraindo as equações resultantes, podemos reescrever a densidade de probabilidade como

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{x}, t) + \frac{\hbar}{2m^*i} [\langle \psi(t) | \nabla^2 | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | \nabla^2 | \psi(t) \rangle \dagger] = 0. \quad \text{B. 6}$$

Considerando $J(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2m^*i} [\langle \psi(t) | \nabla | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | \nabla | \psi(t) \rangle \dagger]$, a B. 6 pode ser escrita na forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho(\vec{r}, t) + \nabla \cdot J(\vec{r}, t) = 0, \quad \text{B. 7}$$

em que $\nabla \cdot J(\vec{r}, t) = \frac{\hbar}{2m^*i} [\langle \psi(t) | \nabla^2 | \psi(t) \rangle - \langle \psi(t) | \nabla^2 | \psi(t) \rangle \dagger]$. Ou seja, $J(\vec{r}, t)$ representa uma densidade de corrente.

Dessa forma é direto notar que a evolução temporal das funções de onda de um determinado sistema pelo método *Split Operator*, pode ser utilizada para calcular o espectro de corrente desse sistema sujeito a um campo externo. Para tanto reescrevemos a densidade de corrente como (DEGANI *et al.*, 2011)

$$J(\vec{r}, t) = \Re \left[\frac{-i\hbar}{m^*} \langle \psi(t) | \nabla | \psi(t) \rangle \right]_{r=\pm r_c}, \quad \text{B. 8}$$

em que $r = \pm r_c$ é um ponto no qual a corrente é calculada. Integrando a densidade de corrente no tempo, temos a corrente no sistema

$$I = \frac{e}{T_f} \int_0^{T_f} (J_{dir}(\vec{x}, t) - J_{esq}(\vec{x}, t)) dt. \quad \text{B. 9}$$

$J_{dir(esq)}$ representa a densidade de corrente do lado direito (esquerdo) da região ativa do potencial, e é a carga do elétron e T_f é um limite superior para a integração temporal que depende do campo externo utilizado para a geração de corrente (MAIALLE *et al.*, 2011).

Dadas as escalas nanométricas dos problemas que analisamos consideramos a aproximação de dipolo elétrico na qual campos oscilantes clássicos produzem os mesmos efeitos, do ponto de vista computacional, de campos totalmente quantizados, os fótons. Dessa maneira, um campo elétrico oscilante pode ser visto tanto como um feixe de laser quanto como um campo alternado oscilando muito rápido, o qual tira o sistema do equilíbrio. Nós trabalhamos a segunda possibilidade, mas adotamos a primeira nos referindo à corrente obtida pela aplicação desse campo oscilante como fotocorrente. Considerando ainda que o sistema está sujeito às condições de contorno do tipo poço infinito, impomos na evolução temporal que a função de onda seja nula nos limites do sistema. Esse tipo de condição de contorno é muito simples de ser tratada, porém exige que utilizemos sistemas grandes para evitar efeitos de quantização por parte das barreiras infinitas. Além disso, efeitos espúrios podem ocorrer na corrente, devido a reflexões nessas barreiras infinitas. Para contornar tais dificuldades, são utilizadas barreiras imaginárias dependentes da energia do fóton incidente nos extremos do sistema para absorver as funções de onda e evitar reflexões (VIBÓK *et al.*, 1996).

No caso dos problemas resolvidos nesse trabalho, o Hamiltoniano unidimensional do sistema tem a forma

$$H(z, t) = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2}{dz^2} + V(z) - ez(F_s + F_d \sin \omega t), \quad \text{B. 10}$$

em que $V(z)$ é o potencial que descreve a estrutura, $F_{s(d)}$ é a amplitude de um campo elétrico estático (dinâmico/oscilante) aplicado à estrutura, ω é a frequência do campo oscilante, a qual está diretamente relacionada à frequência do fóton incidente. Ou seja, a fotocorrente é obtida por meio da evolução temporal de um autoestado do sistema, o qual está sujeito à aplicação de campos elétricos estáticos e dinâmicos.

B.2. Absorção óptica

Dada a importância de se entender as transições responsáveis pela geração de fotocorrente nos sistemas semicondutores sobre análise, foi também calculado o espectro de absorção óptica de um elétron ocupando inicialmente um estado estacionário do sistema $|\phi_n\rangle$ com uma energia E_n .

Supondo que o estado $|\psi_F(t)\rangle$ possa ser escrito com a combinação linear dos autoestados $|\phi_n\rangle$ de um sistema quântico

$$|\psi_F(t)\rangle = \sum_n a_n e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} |\phi_n\rangle, \quad \text{B. 11}$$

esse estado $|\psi_F(t)\rangle$ contém projeções em todos os estados do sistema, existindo assim uma grande chance de que sua evolução temporal forneça o acoplamento entre todos os autoestados desse sistema.

Calculando a correlação temporal do dipolo elétrico entre $|\psi_F(t)\rangle$ e $|\psi(0)\rangle$ que representa um estado inicialmente ocupado, temos

$$\langle\psi(0)|-ez|\psi_F(t)\rangle = \sum_{n,m} a_m^* a_n e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(z)(-ez)\psi_n^*(z)dz. \quad \text{B. 12}$$

Tomando a transformada de Fourier de B. 12

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle\psi(0)|-ez|\psi_F(t)\rangle e^{i\omega t} dt = \alpha_{nm} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{iE_n t}{\hbar}} e^{i\omega t} dt \quad \text{B. 13}$$

em que $\alpha_{nm} = \sum_{n,m} a_m^* a_n \int_{-\infty}^{\infty} \phi_m^*(z)(-ez)\psi_n^*(z)dz$ é reconhecido como o coeficiente de absorção óptica entre os estados m e n . Percebemos diretamente que a integral do lado direito da equação representa uma função delta de Dirac entre as frequências E_n/\hbar e ω , o que leva a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \langle\psi(0)|-ez|\psi_F(t)\rangle e^{i\omega t} dt = 2\pi\alpha_{nm}\delta\left(\frac{E_n}{\hbar} - \omega\right). \quad \text{B. 14}$$

Assim, a absorção óptica α_{nm} entre os autoestados de um sistema pode ser descrita pela transformada de Fourier da função de correlação temporal do dipolo elétrico, dada por (DEGANI *et al.*, 2011).

$$\alpha_n(t) \sim \int_{-\infty}^{\infty} \langle\psi(0)|-ez|\psi_F(t)\rangle e^{i\omega t} dt. \quad \text{B. 15}$$

A evolução temporal de $|\psi_F(t)\rangle$ pode ser obtida pelo método *Split Operator* descrito anteriormente, mas é importante ressaltar que mais uma vez não fazemos essa decomposição na base dos autoestados, como mostra a B.11. Esse procedimento foi apenas apresentado para argumentar a utilização da correlação temporal dada pela B. 15. Nós computamos a absorção óptica da seguinte forma: Primeiramente o estado $|\psi_F(t=0)\rangle$, que deve conter projeções em todos os estados, é obtido pela aplicação de um campo elétrico externo na estrutura,

adicionando-se um termo exF_s no Hamiltoniano do sistema, em que F_s é a amplitude desse campo. Depois, o campo elétrico é retirado e o estado $|\psi_F(t = 0)\rangle$ é evoluído temporalmente dando origem ao estado $|\psi_F(t)\rangle$. A cada passo de tempo da evolução é calculada correlação temporal do dipolo elétrico, com um autoestado do sistema não perturbado pelo campo externo $|\psi(0)\rangle$. Finalmente a transformada de Fourier é calculada, obtendo o espectro de absorção.

Outra maneira é calcular a absorção óptica através do conhecimento direto dos autoestados do sistema, assim como descrito na seção 2.1, os quais podem ser obtidos pelo método *Split Operator*, porém realizando uma evolução em tempo imaginário. Dessa forma podemos escrever a absorção como (COHEN-TANNOUJDI *et al.*, 1977)

$$\alpha(E) = \sum_n \frac{f_{if}\Gamma}{2\pi[(E-E_f)^2 + \frac{1}{4}\Gamma^2]}, \quad \text{B. 16}$$

em que E é a energia do fóton incidente, responsável pela transição entre dois estados $|\phi_i\rangle$ e $|\phi_f\rangle$, com energias E_i e E_f , respectivamente. f_{if} é a força de oscilador da transição entre os estados calculada como

$$f_{if} = \frac{2m^*}{\hbar^2} \Delta E |\langle \psi_i | z | \psi_f \rangle|^2, \quad \text{B. 17}$$

com $\Delta E = E_f - E_i$ sendo a separação de energia entre o estado final $|\psi_f\rangle$ e o estado inicial $|\psi_i\rangle$, que participam da transição. Γ é uma constante ajustável que determina a largura de funções Lorentzianas utilizadas para resolver os picos no espectro de absorção e acrescentar efeitos de alargamento no espectro de absorção não considerados em nosso modelo simples.

B.3. Espectros de transmissão eletrônica

Calculamos também o coeficiente de transmissão através das estruturas. Para tanto, mais uma vez resolvemos a equação de Schrödinger unidimensional numericamente, discretizando o potencial numa grade uniforme com $j = N + 1$ pontos, usando as condições de contorno e a continuidade das funções de onda e de suas derivadas (DEGANI *et al.*, 2011). A Figura 18 esquematiza como o sistema é descrito, representando as ondas incidente, refletida e transmitida pelo potencial.

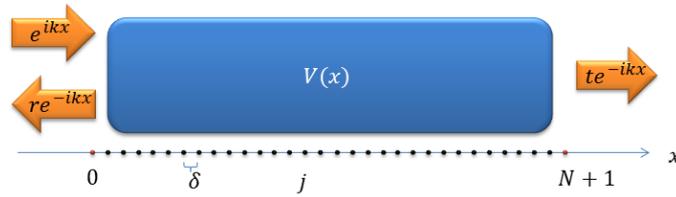


Figura 18 - Esquema de discretização do sistema para a resolução da equação de Schrödinger usando as condições de contorno. Estão representadas as ondas incidente, refletida e transmitida no potencial.

Supondo que a região ativa do potencial esteja entre os pontos $1 \leq j \leq N$, temos que nos pontos $j = 0$ e $j = N + 1$, o potencial é nulo e, com isso, a função de onda unidimensional dos elétrons nessas regiões é dada por ondas planas, as quais podem ser transmitidas ou refletidas pelo potencial. Assim para os pontos $j = 1$ e $j = N$ que correspondem a $x = -L/2$ e $x = L/2$, em que L é o tamanho da região ativa do potencial, temos que as funções de onda e suas derivadas podem ser escritas em função das ondas de uma partícula incidente sobre o potencial e refletida por este

$$|\psi(-L/2)\rangle = |\psi_1\rangle = e^{\frac{ikL}{2}} + re^{-\frac{ikL}{2}} \quad \text{B. 18}$$

$$|\psi(L/2)\rangle = |\psi_N\rangle = te^{\frac{ikL}{2}} \quad \text{B. 19}$$

$$\frac{d}{dx} |\psi(-L/2)\rangle = \frac{d}{dx} |\psi_1\rangle = ik \left(e^{\frac{ikL}{2}} - re^{-\frac{ikL}{2}} \right) \quad \text{B. 20}$$

$$\frac{d}{dx} |\psi(L/2)\rangle = \frac{d}{dx} |\psi_N\rangle = iKte^{\frac{ikL}{2}} \quad \text{B. 21}$$

Manuseando as B. 18-21, discretizando o potencial e as derivadas da equação de Schrödinger, é possível obtermos as funções de onda para os pontos $j = 0$ e $j = N + 1$,

$$|\psi_0\rangle = 2ik\delta|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle + 4ik\delta|1\rangle \quad \text{B. 22}$$

$$|\psi_{N+1}\rangle = |\psi_{N-1}\rangle + 2iK\delta|\psi_N\rangle \quad \text{B. 23}$$

em que δ é mais uma vez a separação entre os pontos da grade, $|1\rangle$ é um vetor com a mesma dimensão de $|\psi_0\rangle$ com apenas o primeiro elemento não nulo e igual a 1. Os vetores de onda k e K são definidos pela energia da partícula incidente E

$$k = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} \left(E - V \left(-\frac{L}{2} \right) \right)} \quad \text{B. 24}$$

$$K = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} \left(E - V \left(\frac{L}{2} \right) \right)}, \quad \text{B. 25}$$

sendo $V \left(\pm \frac{L}{2} \right)$ o potencial nos pontos $x = \pm \frac{L}{2}$, respectivamente.

A partir dessas funções de onda podemos resolver a equação de Schrödinger numericamente para todo o potencial, levando a

$$\begin{pmatrix} B_1 & C_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ A_1 & B_2 & C_2 & \dots & \dots & 0 \\ 0 & A_1 & B_3 & C_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & A_1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & A_N & B_N \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\psi_1\rangle \\ |\psi_2\rangle \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ |\psi_N\rangle \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} G \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad \text{B. 26}$$

em que $G = 4ik\delta D$, $D = -\hbar^2/2m^*\delta^2$ e

$$(A_j, C_j) = \begin{cases} (0, 2D) \Rightarrow j = 1 \\ (-D, D) \Rightarrow j \neq 1, N \\ (-2D, 0) \Rightarrow j = N \end{cases} \quad \text{B. 27}$$

$$B_j = \begin{cases} 2D(1 - ik\delta) + V_1 - E \Rightarrow j = 1 \\ -2D + V_j - E \Rightarrow j \neq 1, N \\ -2D(1 - iK\delta) + V_N - E \Rightarrow j = N \end{cases} \quad \text{B. 28}$$

Assim o coeficiente de transmissão $T = ||\psi_N\rangle|^2$ é obtido pela resolução do sistema de equações tridiagonal determinado pela B. 26, em função da energia da partícula incidente E .

APÊNDICE C

Durante o período do doutorado foram realizados outros estudos, diretamente relacionados com os trabalhos apresentados nas últimas seções da tese. Iniciamos a apresentação com os resultados de cálculos de corrente de escuro proveniente da estrutura de poços quânticos múltiplos da seção 4, como sendo uma primeira caracterização de tal estrutura tendo em vista seu funcionamento como um fotodetector de infravermelho. Posteriormente, assim como mencionado na seção 5, apresentaremos resultados referentes à aplicação das técnicas utilizadas para a obtenção de fotocorrentes polarizadas em spin em uma estrutura semicondutora formada por compostos DMS da família II-VI, ZnMnSe.

C.1. Corrente de escuro

A corrente de escuro se caracteriza por uma corrente indesejada que surge por processos não relacionados com a excitação óptica e é tida como um dos principais limitantes para a operação dos fotodetectores de infravermelho (ETTEH *et al.*, 2002; ALTIN *et al.*, 2011; DONCHEV *et al.*, 2002). Ela contribui para o ruído do detector além de limitar sua temperatura de operação, de modo que entender os mecanismos responsáveis por sua geração são de extrema importância para o projeto e otimização dos QWIP (SCHNEIDER *et al.*, 2007).

Os modelos que descrevem as origens da corrente de escuro nos fotodetectores de infravermelho destacam principalmente três processos (ALTIN *et al.*, 2011; LEVINE, 1993): a emissão termiônica, o tunelamento assistido termicamente e o tunelamento sequencial. O primeiro processo se caracteriza por processos de excitação de origem térmica os quais são dominantes em altas temperaturas. O segundo processo é caracterizado pela ativação térmica e o tunelamento para estados do contínuo através do topo das barreiras triangulares formada pela presença do campo elétrico aplicado na estrutura. Já o último processo se caracteriza pelo tunelamento sequencial dos portadores de carga através das barreiras que formam a estrutura e é dominante em baixas temperaturas.

Dentre os modelos mais aceitos para descrever a corrente de escuro em QWIP, está o modelo de captura e emissão no qual os processos de aprisionamento ou captura são considerados para balancear a emissão ou o escape dos portadores do PQ (ALTIN *et al.*, 2011). A corrente de escuro é proporcional a $k_B T e^{-\frac{\epsilon_B - \epsilon_F}{k_B T}}$, T a temperatura do dispositivo, ϵ_B

é o topo da barreira e ϵ_F é o nível de Fermi (DONCHEV *et al.*, 2002). Como o gás de elétrons no poço não é completamente degenerado, a dependência com a temperatura do nível de Fermi deve ser levada em conta,

$$E_F(T) = E_0 + k_B T \ln\left(\frac{n}{\rho k_B T}\right), \quad \text{C. 1}$$

em que n é a concentração de elétrons, ρ é a densidade de estados bidimensional e E_0 é o primeiro estado quantizado no poço quântico. Com isso, a corrente de escuro pode ser escrita como

$$I \sim \frac{n}{\rho} e^{-\frac{\epsilon_B - \epsilon_0}{k_B T}}. \quad \text{C. 2}$$

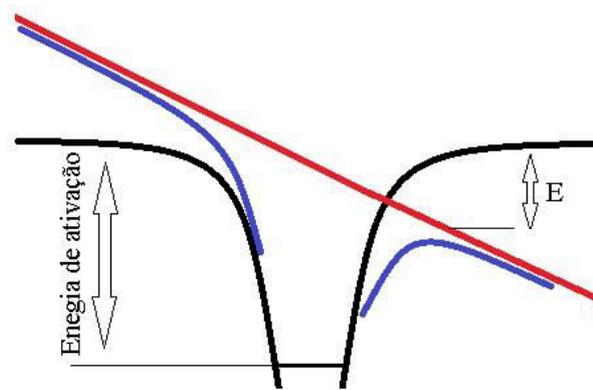


Figura 19 - Modelo de diminuição da energia de ativação eletrônica. A linha preta representa uma barreira coulombiana sem a presença de campo elétrico. A linha azul representa o perfil de potencial na presença de campo elétrico. A linha vermelha é proporcional ao campo aplicado (efeito Stark).

Como efeito do campo elétrico, a energia de ativação diminui com o aumento deste, o que é devido principalmente ao efeito Stark e ao efeito Poole-Frenkel (DONCHEV *et al.*, 2002), como mostra a Figura 19. Tais efeitos estão relacionados respectivamente à diminuição da barreira pelo campo elétrico aplicado em cada PQ e à diminuição da barreira de potencial após a emissão de um elétron deixando um buraco na estrutura, gerando um efeito de interação excitônica.

Outro modelo para a corrente de escuro que podemos destacar é o modelo de Levine (LEVINE, 1993), que fornece o número efetivo de elétrons que são termicamente excitados para fora dos poços quânticos em estados do contínuo, como uma função da voltagem

aplicada na estrutura, originando a corrente de escuro. No modelo, a corrente de escuro é expressa como (SCHNEIDER *et al.*, 1997)

$$I_{dark} = \frac{eN_{2D}}{L_P} v \quad \text{C. 3}$$

em que N_{2D} é a densidade de portadores bidimensional, L_P o comprimento de um período da região ativa do detector e v é a velocidade de transporte ao longo do QWIP. Nesse caso, o cálculo da corrente de escuro depende de uma boa estimativa da densidade de portadores na estrutura.

Considerando processos de espalhamento, podemos escrever a densidade bidimensional como

$$N_{2D} = \int_{E_1}^{\infty} \frac{m}{\pi\hbar^2} T(E, F) \left[1 + \exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right) \right]^{-1} dE. \quad \text{C. 4}$$

$T(E, F)$ é o coeficiente de transmissão através da barreira que pode ser determinado por exemplo pela aproximação WKB. A corrente de escuro é dada por

$$I_{dark} = \frac{e}{L_P} v \int_{E_1}^{\infty} \frac{m}{\pi\hbar^2} T(E, F) \left[1 + \exp\left(\frac{E-E_F}{k_B T}\right) \right]^{-1} dE. \quad \text{C. 5}$$

No regime de emissão puramente termiônico, a contribuição do tunelamento pode ser desprezada de modo que $T(E, F) = 0$. Com isso, a corrente de escuro dada pelo modelo de Levine assume a forma

$$I_{dark}^T = \frac{em}{\pi\hbar^2 L_w} F L_B e^{\frac{-V_B - eFL_w - E_F}{k_B T}}, \quad \text{C. 6}$$

em que L_w é a largura do poço quântico, L_B a largura da barreira de potencial, F o campo elétrico externo aplicado ao QWIP e V_B a altura da barreira de potencial.

Esse modelo tem sido extensivamente comparado aos experimentos (ALTIN *et al.*, 2011; LEVINE, 1993; LHILLIER *et al.*, 2009) e, dada sua simplicidade, os resultados obtidos se mostram muito satisfatórios. Altin e colaboradores (ALTIN *et al.*, 2011) e Lhillier e colaboradores (LHILLIER *et al.*, 2009) concluíram que no regime de altas temperaturas, em

comparação com os modelos de Liu e Schneider (SCHNEIDER *et al.*, 1997), com o modelo de emissão e captura e com o modelo de 3D-Drift (ALTIN *et al.*, 2011), o modelo que melhor descreve os resultados experimentais é o modelo de Levine.

Porém, no regime de baixas temperaturas em que processos de espalhamento e tunelamento sequencial se tornam mais evidentes e dominam a corrente de escuro, todos esses modelos citados anteriormente falham, descrevendo apenas o comportamento assintótico e a ordem de grandeza do sinal de corrente. Mesmo assim o modelo que melhor descreve a corrente de escuro encontrada experimentalmente continua sendo o modelo de Levine (ALTIN *et al.*, 2011; LHILLIER *et al.*, 2009). Sabendo que em alguns tipos de aplicações a operação em temperaturas criogênicas não é um problema, é necessário o desenvolvimento de novos modelos que possam descrever de maneira melhor os mecanismos físicos da corrente de escuro no regime de baixas temperaturas em que os efeitos quânticos são mais importantes (TRINITÉ *et al.*, 2011; LHILLIER *et al.*, 2009). Para resolver esse problema novos modelos microscópicos usando aproximações de espalhamento têm sido criados, nos quais todas as interações importantes são levadas em conta, ponderando entre processos de espalhamento coerentes e incoerentes. Os resultados obtidos têm se mostrado bastante satisfatórios.

Utilizamos aqui o modelo de Levine para obter uma estimativa do comportamento da corrente de escuro para a estrutura de poços quânticos múltiplos com barreiras de filtro. É geralmente reportado na literatura a aproximação da probabilidade de transmissão $T(E, F) = 1$, o que não deve descrever corretamente a probabilidade de transmissão em uma estrutura real, composta por poços quânticos.

Propomos nesse estudo uma modelagem um pouco diferente, na qual assumimos que a corrente de escuro total é composta pela soma da corrente de elétrons em poços diferentes da estrutura. Em outras palavras, como podemos observar na Figura 20, a probabilidade de transmissão é calculada primeiramente para uma barreira simples, que representa o potencial “visto” por um elétron localizado no primeiro PQ. Analogamente, um elétron localizado no segundo PQ “vê” um potencial do tipo dupla barreira e assim sucessivamente.

Para testar a aplicabilidade do método proposto, analisamos a corrente de escuro de uma estrutura de PQM utilizada como QWIP com resultados experimentais reportados por Schneider (SCHNEIDER *et al.*, 2007). A estrutura é composta de uma série de poços quânticos de GaAs com barreiras de $\text{Al}_{0,25}\text{Ga}_{0,75}\text{As}$, cujos resultados experimentais de corrente de escuro para 77 K são mostrados pela curva com pontos abertos na Figura 21. A curva vermelha na figura representa os resultados utilizando o método de Levine para $T(E, F) = 1$. Como podemos notar o modelo descreve bem os resultados experimentais no regime de baixos valores de campo elétrico, mas tem um desvio considerável para valores

maiores de campo. A curva marrom mostra os resultados de corrente de escuro utilizando o modelo que descrevemos anteriormente. A transmissão para cada poço foi calculada pelo método descrito no Apêndice B, a qual foi adicionada ao modelo de Levine e foram somadas as contribuições de 10 PQ. Como podemos notar, com o modelo proposto conseguimos melhor reproduzir os resultados experimentais, principalmente na região de altos valores de campo. Esse melhor ajuste pode estar associado à importância do tunelamento para altos valores campos, condição na qual a estrutura se torna mais transparente para os elétrons.

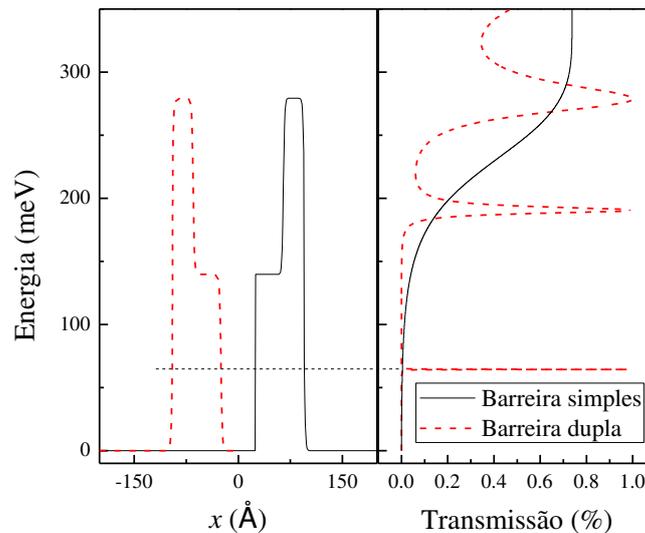


Figura 20 – Probabilidade de transmissão para partes da estrutura de PQM. A curva preta sólida apresenta a transmissão para apenas uma barreira simples, esquematizando o perfil de potencial “visto” por um elétron confinado no primeiro poço quântico. Da mesma forma, a curva vermelha pontilhada apresenta a transmissão para uma dupla barreira esquematizando o potencial “visto” por um elétron no segundo PQ.

Sendo assim, aplicamos tal modelo para a estrutura de PQM. Esperamos que as barreiras de filtro influenciem diretamente na corrente de escuro, a reduzindo. Essa expectativa é devida à seletividade introduzida aos estados do contínuo pelas barreiras de filtro e também pela inibição de processos de absorção por fônons (DEGANI *et al.*, 2011). Como podemos ver na Figura 22, que mostra a corrente de escuro para a estrutura com e sem as barreiras de filtro, essa corrente é significativamente reduzida para altos valores de campo ao introduzirmos tais barreiras.

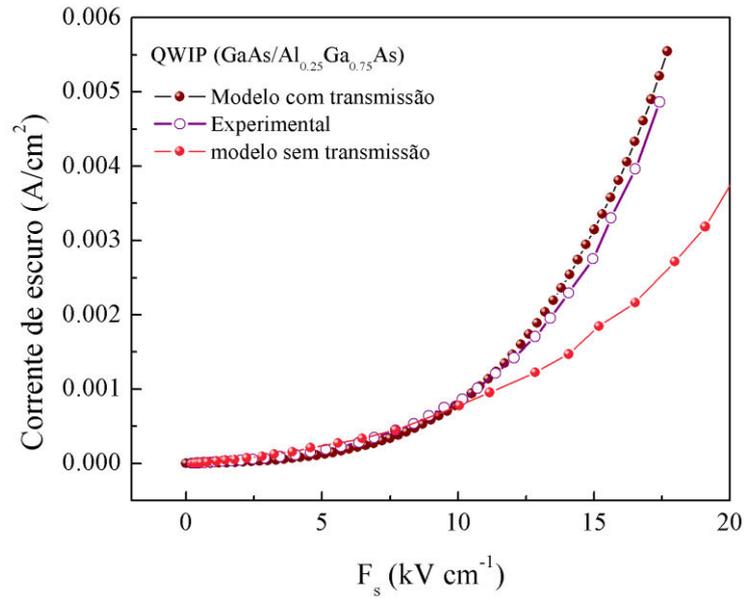


Figura 21 – Resultados de corrente de escuro para uma estrutura de poços quânticos múltiplos (SCHNEIDER *et al.*, 2007). A curva roxa com pontos abertos mostra os resultados experimentais, a curva vermelha mostra os resultados obtidos pelo modelo de Levine para $T(E, F) = 1$ e a curva marrom mostra os resultados obtidos pelo modelo de Levine levando em consideração a transmissão.

Os resultados apresentados aqui são uma primeira estimativa da corrente de escuro da estrutura de PMQ com barreiras de filtro. Como a corrente de escuro apresenta outras contribuições bastante significativas, como a influência de fônons e espalhamentos, por exemplo, um tratamento mais completo deve ser realizado.

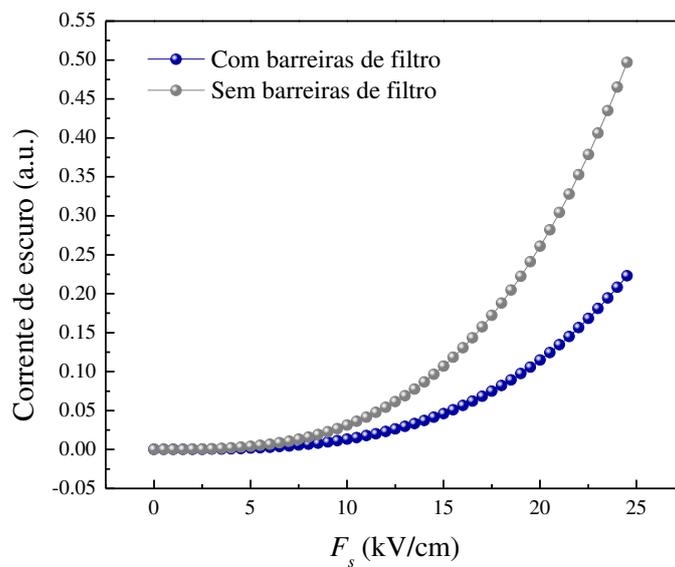


Figura 22 – Corrente de escuro para a estrutura de PMQ com (curva azul) e sem (curva cinza) as barreiras de filtro.

C.2. Fotocorrente polarizada em spin para estruturas de ZnMnSe

O mesmo procedimento aplicado nas estruturas de GaMnAs para conseguir fotocorrente polarizada em spin foi utilizado para uma estrutura composta de um PQ com uma camada DMS de ZnMnSe. Como discutido na seção 5, a vantagem na utilização de estruturas da família II-VI é dada pela alta solubilidade de Mn em tais estruturas, quando comparadas às estruturas da família III-V.

Propusemos uma estrutura nos moldes da estrutura de GaMnAs, formada por um poço quântico composto por duas camadas, sendo uma camada não magnética de ZnSe de 12 nm de espessura seguida por uma camada DMS de $Zn_{0,9}Mn_{0,1}Se$ de 12 nm. O PQ foi colocado entre camadas de $Zn_{1-y}Be_ySe$, com concentrações (y) diferentes de berílio entre as camadas. Do lado esquerdo $y = 0,03$, gerando um *band offset* na banda de condução de 92 meV (MING *et al.*, 2011). Mais uma vez essa barreira é utilizada para evitar o fluxo de elétrons do lado esquerdo da estrutura, mesmo na ausência do campo elétrico. Do lado direito do PQ foi colocada uma camada fina de $Zn_{1-y}Be_ySe$ de 3nm de espessura com a mesma concentração de berílio daquela do lado esquerdo da estrutura, seguida por um contato formado por uma camada de $Zn_{1-y}Be_ySe$ com concentração de berílio $y = 0,011$, gerando um *band offset* com a camada de ZnSe do PQ de aproximadamente três vezes a separação devida ao GZS para um campo magnético de 5 T. O perfil de potencial da estrutura para campos elétricos de $F_s = 3$ e 7 kVcm^{-1} está apresentado na Figura 23. Nela mostramos também os módulos quadrados das autofunções da estrutura, destacando os estados dos PQ.

Assim como no caso da estrutura de GaMnAs, a presença da camada DMS apenas em parte do poço gera uma assimetria entre as componentes de spin. Como podemos observar na Figura 23(a), o PQ da componente spin \downarrow do potencial efetivo gerado pela presença da camada DMS, apresenta três estados ligados sendo que o terceiro E_3^\downarrow pode ser convertido num estado de contínuo com a presença do campo elétrico (Figura 23(b)). Já o PQ da componente de spin \uparrow , apresenta apenas dois estados ligados no PQ e o terceiro estado E_3^\uparrow é um estado de contínuo independentemente do campo elétrico (Figuras 23(c) e (d)). Para essa estrutura, a geração de fotocorrente é devida à transição entre os estados fundamentais dependentes de spin e os terceiros estados $E_3^{\downarrow,\uparrow}$.

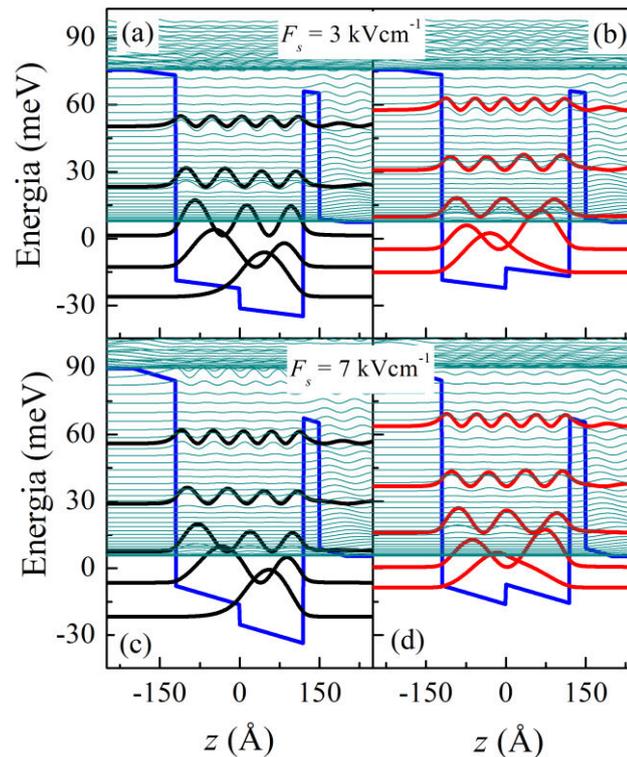


Figura 23 – Perfil de potencial da estrutura de ZnMnSe para a componente de spin \downarrow para (a) $F_s = 3 \text{ kV cm}^{-1}$ e (c) $F_s = 5 \text{ kV cm}^{-1}$. (b), (d) o mesmo que (a), (c), respectivamente, para a componente de spin \uparrow . Para essa estrutura, a camada DMS se encontra do lado direito da estrutura.

Sendo assim, para $F_s = 3 \text{ kVcm}^{-1}$ esperamos a geração apenas de fotocorrente com polarização spin \uparrow . Aumentando o campo para $F_s = 7 \text{ kVcm}^{-1}$, o estado E_3^\downarrow passa a ser um estado de contínuo e esperamos a geração de fotocorrente para ambas as componentes. No entanto, o estado fundamental da componente spin \uparrow com a deformação da estrutura gerada pelo campo elétrico, assume um caráter do tipo paridade com relação ao centro da estrutura e a probabilidade transição entre esse estado fundamental e o estado E_3^\uparrow fica reduzida, reduzindo a componente de spin \uparrow da fotocorrente. Essa componente é ainda mais prejudicada pelo desequilíbrio gerado nas ocupações pela diferença de energia entre os estados fundamentais das componentes de spin, como mostra a Tabela 3.

Tabela 3 - Valores das energias do estado fundamental para as componentes de spin em função do campo elétrico aplicado, separação entre tais estados e respectiva ocupação.

$F_s \text{ (kVcm}^{-1}\text{)}$	$E_1^\downarrow \text{ (meV)}$	$E_1^\uparrow \text{ (meV)}$	$\Delta E \text{ (meV)}$	$[\downarrow] \%$	$[\uparrow] \%$
3	-26,1	-15,1	11	82	18
7	-21,8	-8,7	13,1	88	12

Na Figura 24 apresentamos os resultados de fotocorrente para a estrutura de ZnMnSe, nos quais o fator de ocupação foi adicionado. Como podemos observar, para $F_s = 3 \text{ kVcm}^{-1}$ (Figura 24(a)) a fotocorrente apresenta apenas um pico proveniente da componente de spin \uparrow em torno de 25 meV. Aumentando o campo para $F_s = 7 \text{ kVcm}^{-1}$ (Figura 24(b)), temos uma redução muito acentuada do pico de spin \uparrow e o aparecimento do pico de spin \downarrow em torno de 29 meV. Diferentemente do caso da estrutura de GaMnAs na qual os *band offsets* são maiores, não conseguimos que os picos de fotocorrente das diferentes componentes de spin ocorressem para a mesma energia. Para a estrutura de ZnMnSe os estados são mais próximos devido aos menores *band offsets* e maior massa efetiva, de modo que o degrau no fundo PQ influencia de forma mais acentuada do que na estrutura de GaMnAs.

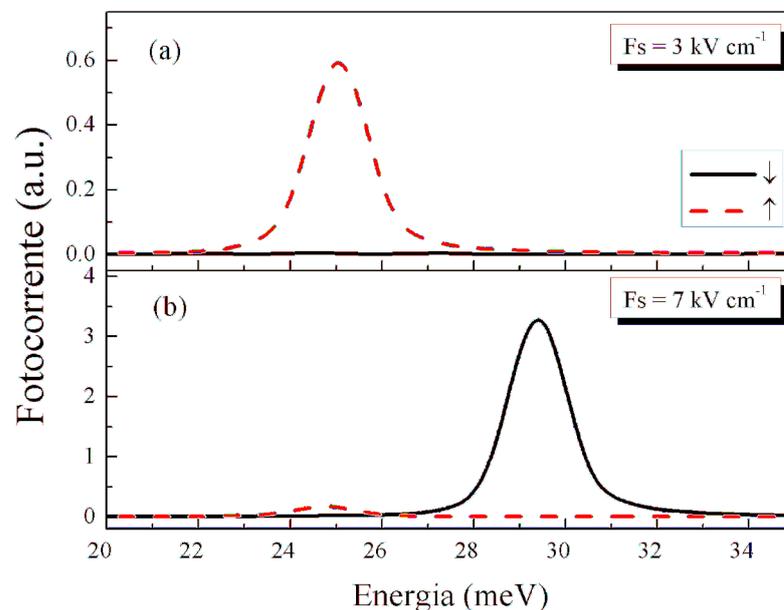


Figura 24 – Fotocorrente da estrutura de ZnMnSe para (a) $F_s = 3 \text{ kVcm}^{-1}$ e (b) $F_s = 7 \text{ kVcm}^{-1}$

No entanto, mais uma vez, temos um controle muito efetivo da polarização de spin da fotocorrente gerada pela estrutura de ZnMnSe, para excitações com fótons com frequência entre 6 e 7 THz.