



FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE RONDÔNIA
NÚCLEO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

PROPAGAÇÃO DE PACOTES DE ONDAS EM UM CANAL
POROSO

Daniel Suárez Lopes

21 de Maio de 2021 - Porto Velho/RO



FUNDAÇÃO UNIVERSIDADE FEDERAL DE RONDÔNIA
NÚCLEO DE CIÊNCIAS EXATAS E DA TERRA
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

PROPAGAÇÃO DE PACOTES DE ONDAS EM UM CANAL POROSO

Daniel Suárez Lopes

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Departamento de Física da Fundação Universidade Federal de Rondônia - UNIR, campus José Ribeiro Filho - Porto Velho/RO, como parte dos requisitos necessários para obtenção do título de licenciado em Física.

Orientador: *Prof. Dr. Ariel Adorno de Sousa*

21 de Maio de 2021 - Porto Velho/RO

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Fundação Universidade Federal de Rondônia
Gerada automaticamente mediante informações fornecidas pelo(a) autor(a)

L864p Lopes, Daniel Suárez.
Propagação de pacotes de ondas em um canal poroso / Daniel Suárez
Lopes. -- Porto Velho, RO, 2021.

82 f. : il.

Orientador(a): Prof. Dr. Ariel Adorno de Sousa

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Física) - Fundação
Universidade Federal de Rondônia

1.Semicondutores. 2.Canal Quântico Poroso. 3.Pacotes de Ondas.
4.Equação de Schrödinger. 5.Técnica Split-Operator. I. Sousa, Ariel Adorno
de. II. Título.

CDU 621.3.029



PROPAGAÇÃO DE PACOTES DE ONDAS EM UM CANAL POROSO

Daniel Suárez Lopes

Trabalho de Conclusão de Curso submetido ao departamento de física da Fundação Universidade Federal de Rondônia, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de licenciado em Física.

Aprovada por:

Prof. Dr. Ariel Adorno de Sousa

(Orientador)

Profa. Dra. Dieime Custódia da Silva

(Membro da Banca)

Prof. Dr. Elie Albert Moujaess

(Membro da Banca)

Dedico este trabalho à Deus, à minha família, meus amigos e a todos que de forma direta ou indireta me ajudaram nas horas difíceis, e por me darem coragem para prosseguir.

"O mais importante da vida não é a situação em que estamos, mas a direção para a qual nos movemos." Oliver Wendell Holmes (1809 - 1894)

Agradecimentos

Quero agradecer a minha família que é parte importante em todas as minhas conquistas.

Agradeço à minha mãe Elena Suárez Delgadillo e ao meu pai Carlos Alberto Lopes Moreno pelo apoio, paciência por sempre acreditarem em mim e sempre me incentivarem.

Agradeço aos meus irmãos Richard Suárez Lopes e Jefersson Suárez Lopes e minhas irmãs Vanessa Suárez Lopes, Angelica Suárez Lopes, Rosa Suárez Lopes, Carla Suárez Lopes e Milka Ester Suárez Lopes por me aconselharem e me colocarem no caminho que devia seguir.

Agradeço ao meu amigo Jean Carlos Rodrigues de Souza pela amizade e companheirismo, por me apoiar mesmo nos momentos difíceis.

Agradeço ao professor e amigo Ariel Adorno de Sousa pela paciência, ajuda e conselhos que levarei para a vida, e pela amizade que foi fundamental para que me tornasse uma pessoa forte e determinada nos meus objetivos.

Agradeço à Professora Dieime Custódia da Silva por ser minha primeira orientadora e me auxiliar na minha caminhada acadêmica.

Agradeço à Professora Anilde Ferreira da Silva por ser uma pessoa muito atenciosa comigo e me ajudar quando mais precisei.

Agradeço ao Professor Judes Gonçalves dos Santos por ser uma pessoa que me ajudou em minhas dificuldades acadêmicas.

Agradeço aos professores do Departamento de Física e de outros departamentos que também foram fundamentais para minha formação acadêmica.

Agradeço FAPERO pelo apoio financeiro em minha primeira pesquisa acadêmica que desenvolvi na universidade.

Agradeço a todos os meus amigos da graduação pela amizade e companheirismo.

Agradeço a CAPES pelo apoio financeiro em minha pesquisa.

Agradeço ao programa PIBIC da UNIR.

Agradeço ao programa de Astronomia da UNIR.

Agradeço à Fundação Universidade Federal de Rondônia.

Agradeço aos que me ajudaram diretamente e indiretamente.

Sumário

Agradecimentos	vii
Lista de Figuras	xi
Lista de Tabelas	xvi
Resumo	xvii
Abstract	xviii
1 Introdução	18
1.1 Breve Histórico	18
1.2 A Estrutura de Bandas	20
1.3 O Teorema de Bloch	22
1.4 Sistemas semicondutores de baixa dimensão	27
2 Modelo Teórico	34
2.1 Teoria da massa efetiva	35
2.2 Aproximação da Função Envelope	38
2.3 Técnica de solução da equação de Schrödinger dependente do tempo: Propagação no Tempo Real	38
3 Fios Quântico Semicondutor	52

3.1	Descrição teórica do modelo	53
4	Resultados e Discussões	59
4.1	Propagação de pacotes de ondas em canal poroso	59
5	Conclusão e Perspectivas Futuras	72
A	Apêndice	73
A.1	Demostrações Matemáticas	73
	Referências Bibliográficas	79

Lista de Figuras

- 1.1 (a) Os cientistas William Bradford Shockley (sentado), Walter Houser Brattain (em pé a direita) e John Bardeen (em pé a esquerda) em um laboratório [1]. (b) Registro do primeiro protótipo de transistor feito de materiais semicondutores. (c) Primeiro Circuito Integrado produzido e desenvolvido por Jack S. Kilby. [4] 19
- 1.2 Em (a) um cristal de parâmetro de rede l . Figura modificada da referência [7]. (b) Um elétron movendo-se na rede cristalina. (c) (Em cima) Ilustração do potencial experimentado por um elétron, quando ele passa ao longo de uma linha através dos íons positivos. O potencial de um elétron no local do íon é zero e é máximo entre dois íons. (Em baixo) Ilustração de uma rede de degraus de potenciais retangulares periódicos unidimensional, sentido quando o elétron passa ao longo de uma linha através dos íons positivos que estão na rede cristalina. Figura adaptada da referência [11]. 22
- 1.3 (a) Banda de condução e valência, a $T = 0 K$, devido a aproximação de um grande número de átomos em um sólido semiconductor. (b) Bandas de energia em um semiconductor GaAs. As regiões hachuradas mostra a ocupação dos elétrons com $T > 0 K$. Figuras modificadas da referência [2]. 26
- 1.4 (a) Estrutura cristalina do semiconductor GaAs. (b) Estrutura de bandas de energia do GaAs. Figuras modificadas da referência [2]. 27

1.5	(a) Micrografia feita pela microscopia eletrônica de transmissão (MET) de uma heteroestrutura AlAs/GaAs retirado da referência [14]. (b) Modelo esquemático de uma heteroestrutura entre dois semicondutores com valores diferentes de gaps, formando degraus de potencial para o elétron na banda de condução e para o buraco na banda de valência [2].	28
1.6	Heterojunção com material semiconductor A fazendo um "sanduíche" no material semiconductor B. A bolinha preenchida em vermelho é o elétron e o círculo em vermelho o buraco. Para (a) tipo-I, (b) tipo-II [13].	29
1.7	(Em cima) Morfologia esquemática do confinamento quântico e da (em baixo) densidade de estados $D(E)$ em função da energia E dos elétrons confinados em diferentes dimensionalidades: (a) bulk, (b) um poço quântico, (c) fio quântico e (d) ponto quântico. A linha vermelha representa a densidade de estados para o elétron na banda de condução. Figura modificada da referência [2].	32
2.1	Discretização do espaço e de uma função definida nesse espaço no caso unidimensional. Figura modificada da referencia [21].	47
3.1	Perfil de potencial onde teremos diferentes larguras de canal (L) que está representada pela variação das setas. Os poros representado em cinza assumem diferentes diâmetros D_1, D_2 e D_3 . O potencial fora do canal (região verde) vale 600 meV e este valor vale também para os poros e dentro do canal (região azul) o potencial é 0 meV . A figura acima do canal, a esquerda, representa o material semiconductor do sistema quântico estudado. fora do canal temos InAlAs e dentro do canal temos InGaAs. A direita, temos um gráfico que mostra auto-estados de um poço quântico, com potencial de confinamento $V_e = 600 \text{ meV}$, para uma largura de canal $L = 10 \text{ nm}$. Figura modificadas da referência [26].	53

- 3.2 Em (a) temos a criação de camadas porosas pelo processo de anodização. (b) Processo recozimento térmico do silício tendo a camada de alta porosidade como separação e de baixa porosidade funciona como camada epitaxial. (c) Fabricação do dispositivo. (d) Separação da camada epitaxial do substrato de silício. (e) Material poroso de silício. Figuras retirada da referência [25]. 54
- 4.1 (Color online) Transmissão em função da energia do pacote de ondas, para valores da largura de canal L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} . As linhas sólidas preta indicam as transmissões, linhas pontilhadas vermelha indicam as reflexões e linhas tracejadas azul indicam $\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1$ 60
- 4.2 (Color online) Transmissão em função da largura do canal, para valores de ε_1 , ε_2 , ε_3 e ε_0 (1° estado excitado). As linhas sólidas preta indicam as transmissões, linhas pontilhadas vermelha indicam as reflexões e linhas tracejadas azul indicam $\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1$ 61
- 4.3 (Color online) Corrente de probabilidade em função do tempo. (a) Corrente de probabilidade para os canais L_{10} (linha tracejada vermelha), L_{30} (linha pontilhada azul) e L_{50} (linha sólida preta) com energia cinética $\varepsilon_1 = 70 \text{ meV}$. Em (b) e (c) tem-se a probabilidade de corrente para as mesmas larguras de canais que em (a), porém, com energia cinética, respectivamente igual a $\varepsilon_2 = 140 \text{ meV}$ e $\varepsilon_3 = 180 \text{ meV}$. Em (d) temos a densidade de corrente, para o pacote de onda se propagando no 1° estado excitado com energia cinética $\varepsilon_0 = 180 \text{ meV}$ para estes canais. 62

- 4.4 (Color online) Em (a) temos o canal semiconductor InAlAs/InGaAs com largura $L_{10} = 10 \text{ nm}$, na direção y . (b) Diagrama representa as bandas de energia para o estado fundamental, 1° e 2° estados excitados do poço quântico com largura L_{10} . (c) Diagramas esquemáticos que representam as energias da sub-banda para L_{10} . Em (d) e (e) temos os gráficos que representam as energias da sub-banda em função do vetor de onda k_x na direção x , para largura de canal L_{10} e L_{20} . Figuras modificadas da referências [26] e [15]. 64
- 4.5 (Color online) Módulo quadrado da função de onda em quatro instantes de tempo diferentes, propagado a partir do estado fundamental com energia cinética $\varepsilon_1 = 70 \text{ meV}$. A primeira coluna mostra o instante $t = 300 \text{ fs}$, enquanto que as colunas seguintes mostram, respectivamente, os instantes $t = 600 \text{ fs}$, $t = 1.200 \text{ fs}$ e $t = 12.600 \text{ fs}$, para larguras de canais: L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} 66
- 4.6 (Color online) (Color online) Módulo quadrado da função de onda em quatro instantes de tempo diferentes, propagado a partir do estado fundamental com energia cinética $\varepsilon_2 = 140 \text{ meV}$. A primeira coluna mostra o instante $t = 300 \text{ fs}$, enquanto que as colunas seguintes mostram, respectivamente, os instantes $t = 600 \text{ fs}$, $t = 1.200 \text{ fs}$ e $t = 12.600 \text{ fs}$, para larguras de canais: L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} 67
- 4.7 (Color online) Módulo quadrado da função de onda em quatro instantes de tempo diferentes, propagado a partir do estado fundamental com energia cinética $\varepsilon_3 = 180 \text{ meV}$. A primeira coluna mostra o instante $t = 300 \text{ fs}$, enquanto que as colunas seguintes mostram, respectivamente, os instantes $t = 600 \text{ fs}$, $t = 1.200 \text{ fs}$ e $t = 12.600 \text{ fs}$, para larguras de canais: L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} 68

- 4.8 (Color online) Módulo quadrado da função de onda em quatro instantes de tempo diferentes, propagado a partir do 1° estado excitado com energia cinética $\varepsilon_0 = 180 \text{ meV}$. A primeira coluna mostra o instante $t = 300 \text{ fs}$, enquanto que as colunas seguintes mostram, respectivamente, os instantes $t = 600 \text{ fs}$, $t = 1.200 \text{ fs}$ e $t = 12.600 \text{ fs}$, para larguras de canais: L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} 69

Lista de Tabelas

1.1	Sistemas de dimensionalidade reduzida e seus respectivos números de graus de liberdade D_l e de direções de confinamento D_c	31
3.1	Parâmetros da liga semicondutora $Ga_xIn_{1-x}As$ [2].	55
4.1	Valores das transmissões e reflexões dos canais L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} para valores de ε_1 , ε_2 e ε_3	61
4.2	Valores das sub-bandas para canais L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} para valor de ε_1	63

Resumo

A descrição Teórica e experimental da propagação de pacotes de ondas em sistemas de baixa dimensionalidade, têm grande importância para o estudo deste sistema, pois são peças fundamentais para a construção de um dispositivo eletrônico. Neste trabalho é apresentado uma pesquisa teórica do transporte de elétrons em sistemas semicondutores formados por fios quânticos obstruídos por barreiras (poros) por meio de diferentes larguras de canais para saída de elétrons. O modelo teórico utilizado baseia-se na solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo, utilizando aproximação da massa efetiva, do formalismo matemático da função envelope e da técnica *split-operator*. A técnica *split-operator* possibilita a separação de operados que não comutam, simplificando a solução numérica da equação de Schrödinger dependente do tempo. As larguras de canais investigados foram de $L_{10} = 10 \text{ nm}$, $L_{15} = 15 \text{ nm}$, $L_{20} = 20 \text{ nm}$, $L_{30} = 30 \text{ nm}$, $L_{40} = 40 \text{ nm}$ e $L_{50} = 50 \text{ nm}$ e as energias cinéticas dos pacotes de ondas usados foram $\varepsilon_1 = 70 \text{ meV}$, $\varepsilon_2 = 140 \text{ meV}$ e $\varepsilon_3 = 180 \text{ meV}$. O potencial de confinamento nestes sistemas se dá na direção do eixo y . O objetivo é investigar a dinâmica da propagação de pacotes de ondas sob efeito de espalhamento produzido por potenciais de obstrução (poros) em relação a largura do canal.

Palavras-chave: Semicondutores. Fios Quânticos. Heteroestruturas. Técnica *split-operator*.

Abstract

Theoretical and experimental description of the wave packet propagation in low dimensional systems, are of great importance for the study of this system, as they are fundamental pieces for the construction of an electronic device. This work presents a theoretical research on electron transport in semiconductor systems formed by quantum wires obstructed by barriers (pores) through different widths of channels for electron output. The theoretical model used is based on the time-dependent numerical solution of the Schrödinger equation, using the effective mass approximation, the mathematical formalism of the envelope function and the split-operator technique. The *split-operator* technique allows the separation of non-switching operands, simplifying the numerical solution of the time-dependent Schrödinger equation. The investigated channel widths are $L_{10} = 10 \text{ nm}$, $L_{15} = 15 \text{ nm}$, $L_{20} = 20 \text{ nm}$, $L_{30} = 30 \text{ nm}$, $L_{40} = 40 \text{ nm}$ and $L_{50} = 50 \text{ nm}$ and the kinetic energies of the wave packets used are $\varepsilon_1 = 70 \text{ meV}$, $\varepsilon_2 = 140 \text{ meV}$ and $\varepsilon_3 = 180 \text{ meV}$. The containment potential in these systems is in the direction of the y axis. The objective is to investigate the dynamics of wave packet propagation under the effect of scattering produced by obstruction potentials (pores) as a function of the width of the channel.

Keywords: Semiconductors. Quantum Wires. Heterostructures. Technique *split-operator*.

Neste capítulo será introduzido um breve histórico sobre o surgimento dos semicondutores, os tipos de nanoestruturas semicondutoras e sua importância para a evolução de equipamentos tecnológicos que estão cada vez menores e com poder de processamento maiores. Será abordado também bandas de energias.

1.1 Breve Histórico

O estudo em semicondutores ganhou força no século XX, nos anos 80 sendo mais preciso. Isso só foi possível graças a Willian Bradford Shockley (1910 - 1989), John Bardeen (1908 - 1991) e Walter Houser Brattain (1902 - 1987), que em 1947, criaram o primeiro transistor ¹ baseado em materiais semicondutores. Nesta mesma época o físico e engenheiro eletricista, Jack S. Kilby (1923 - 2005), criou o primeiro circuito integrado (CI). Na **Figura 1.1 (a)** vemos os criadores do primeiro transistor, no centro (**Figura 1.1 (b)**) vemos a foto do transistor e a esquerda (**Figura 1.1 (c)**) vemos o primeiro CI criado na "*Texas Instruments*" por Jack S. Kilby [1, 2].

Após a criação deste protótipo de transistor não demorou muito para que se tivesse um modelo aperfeiçoado. Com os avanços no estudo da física do estado sólido, o transistor se tornou essencial na indústria eletrônica. Um artigo publicado em 1965 por Gordon Earle Moore [3], presidente da empresa INTEL, enfatizou que miniaturização permitia dobrar o número de transistores em circuitos integrados, sem que houvesse custos adicionais

¹Pela criação deste transistor, Shockley, Bardeen e Brattainos foram contemplados em 1956 pelo prêmio Nobel em Física [2].

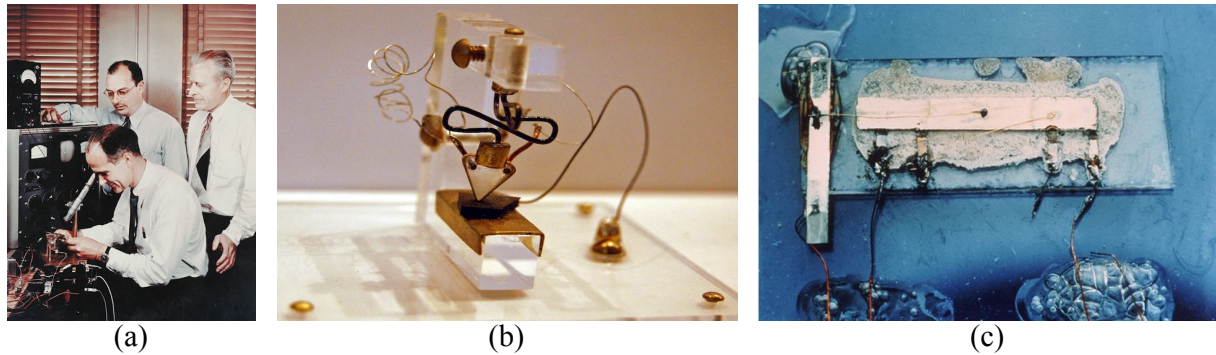


Figura 1.1: (a) Os cientistas William Bradford Shockley (sentado), Walter Houser Brattain (em pé a direita) e John Bardeen (em pé a esquerda) em um laboratório [1]. (b) Registro do primeiro protótipo de transistor feito de materiais semicondutores. (c) Primeiro Circuito Integrado produzido e desenvolvido por Jack S. Kilby. [4]

na sua fabricação [2]. Esta tendência, segundo Moore, seria dobrada a cada 24 meses, e que a mesma deveria continuar, surgindo assim a famosa lei de Moore. Nas últimas décadas, este crescimento do transistor foi observado a cada 18 meses. Isto se reflete nos dias atuais com aparelhos eletrônicos cada vez menores, como os computadores de mão (smartphones, tablets, notebooks), smart tv, supercomputadores, á veículos de transporte (carros, aviões, etc.) [2].

Mesmo com técnicas, como a de crescimento de filmes finos criada nos anos 70, proporcionando um grande avanço na indústria eletrônica, a lei de Moore deverá chegar a um ponto em que deve cessar seu crescimento, segundo previsões da indústria de semicondutores [2]. Isso deve ocorrer pelo fato do processo de litografia, que integra grandes quantidades de circuitos sobre um mesmo substrato semicondutor, esbarrar em limitações de leis físicas. Com a miniaturização dos circuitos integrados e dos transistores, está cada vez mais difícil de se controlar a corrente de fuga e a integridade dos sinais pelo fato de termos números de átomos cada vez menores no processo de miniaturização [2]. Mesmo parando nesta barreira, dispositivos com dimensões menores e com altos desempenhos diminuem o consumo de energia, e o fator economia-desempenho é a explicação para termos um mercado da eletrônica em expansão nas últimas cinco décadas [5, 2].

Atualmente, grande parte dos trabalhos em semicondutores estão voltados para nanoestruturas bidimensionais, como pontos, poços, fios e anéis quânticos, cuja os portadores

de cargas elétricas, como os elétrons e buracos, possuem diferentes graus de confinamentos nessas nanoestruturas. Só foi possível se criar estas nanoestruturas com os avanços de crescimento de materiais semicondutores, como Si, Ge, AlAs, GaAs, entre outros, por processos de litografia [2]. As dispersões de energia de elétrons e buracos destes sistemas são importantes para as propriedades ópticas e eletrônicas dos materiais semicondutores que compõe as nanoestruturas [2].

Uma pesquisa realizada no site de busca de papers, *Science Direct*, revela que nos últimos 23 anos, publicaram-se em revistas e periódicos mais de 504.665 trabalhos baseados em materiais semicondutores. Dentre estes, a maioria de baixa dimensionalidade.

1.2 A Estrutura de Bandas

A teoria das bandas, proposta pelo Físico Felix Bloch (1905 - 1983) em 1928, foi um passo importante para o estudo dos semicondutores como conhecemos hoje [6].

O estudo das estruturas de bandas de energia são fundamentais para a compreensão dos mecanismos responsáveis pela corrente elétrica em materiais semicondutores, e para suas aplicações na nanotecnologia. Para entendermos o que são bandas de energia, começaremos por um problema muito conhecido na teoria quântica que é do modelo do átomo de um elétron. A solução do mesmo na teoria quântica baseia-se na equação de Schrödinger, que possui uma solução exata quando se trata de estruturas atômicas com baixo número atômico (Z). Estes átomos possuem estados quânticos estacionários com níveis de energia quantizados e discretos que correspondem aos orbitais atômicos 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, etc. [7, 8].

Quando temos em média $N \sim 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ átomos dispostos em uma rede cristalina, as considerações são diferentes. Temos nesta situação muitos átomos próximos e o cálculo dos estados eletrônicos se torna complicado por termos muitas interações, como elétron-elétron, elétron-núcleo e núcleo-núcleo (**Equação (1.1)**). Matematicamente, seria como combinar linearmente a solução da função de onda (ψ) de um átomo com a dos outros átomos, ou seja, o elétron que está no 1º nível de energia, 1s, pode ocupar este mesmo estado no átomo vizinho e o mesmo terá duas funções de ondas diferentes que descreverão

estes dois estados quânticos possíveis, porém compartilhando a mesma energia, ou seja, terão uma dupla degenerescência². A degenerescência é quebrada quando são aproximados vários átomos [8].

A equação de Schrödinger completa para esta situação com n elétrons e N núcleos, escrita em termos das coordenadas eletrônicas, $r_1, r_2, r_3, \dots, r_n$ e das coordenadas dos núcleos $R_1, R_2, R_3, \dots, R_N$ é:

$$\left[-\sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 - \sum_{j=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_j} \nabla_j^2 + \frac{1}{2} \sum_{i \neq i'}^n \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|} + \frac{1}{2} \sum_{j' \neq j}^N \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_j Z_{j'} e^2}{|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}|} + \right. \\ \left. - \sum_{j,i}^{N,n} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_j e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|} \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n, \mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_N), \quad (1.1)$$

nesta equação, os termos m_i e M_j são, respectivamente, as massas do i -ésimo elétron e do j -ésimo núcleo, \mathbf{r}_i e \mathbf{R}_j são suas posições, assim como $P_i^2 = -\hbar^2 \nabla_i^2$ e $P_j^2 = -\hbar^2 \nabla_j^2$ são seus momentos lineares ao quadrado, Z_j é o número atômico do núcleo e e é a carga do elétron. Os cinco termos representam, respectivamente, (1) a energia cinética dos elétrons, (2) a energia cinética dos núcleos, (3) a energia potencial de interação Coulombiana entre elétron-elétron, (4) a energia potencial de interação colombiana entre núcleo-núcleo e, por fim, (5) a energia potencial de interação colombiana entre elétron-núcleo. Os termos $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i'}|$, $|\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{j'}|$ e $|\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_j|$ são respectivamente, as distâncias de interação entre o elétron i e o elétron i' , o núcleo j e o núcleo j' e entre o elétron i e o núcleo j . Nesta **Equação (1.1)**, a interação spin-órbita é omitida [9].

Pode-se resolver a **Equação (1.1)** fazendo aproximações, ao menos qualitativamente para entendermos melhor os estados eletrônicos quando temos muitos átomos juntos, conforme será mostrado na próxima seção.

²De forma breve, se tiverem dois ou mais estados físicos diferentes com o mesmo nível de energia, então estes estados são ditos degenerados.

1.3 O Teorema de Bloch

Vamos considerar que temos uma rede cristalina, com potencial $V(\mathbf{x})$, em que os núcleos atômicos (íons positivos) são fixos, com posições conhecidas na rede, **Figura 1.2 (a)**. Um elétron que se desloca nesta rede, representado na **Figura 1.2 (b)**, sente uma série de poços retangulares atrativos de profundidade U e largura b (representando os "íons" - elétrons que estão fortemente ligados aos núcleos e são menos suscetíveis a mudança de estado)³, com período espacial: $l = a + b$, **Figura 1.2 (c)** [10, 7].

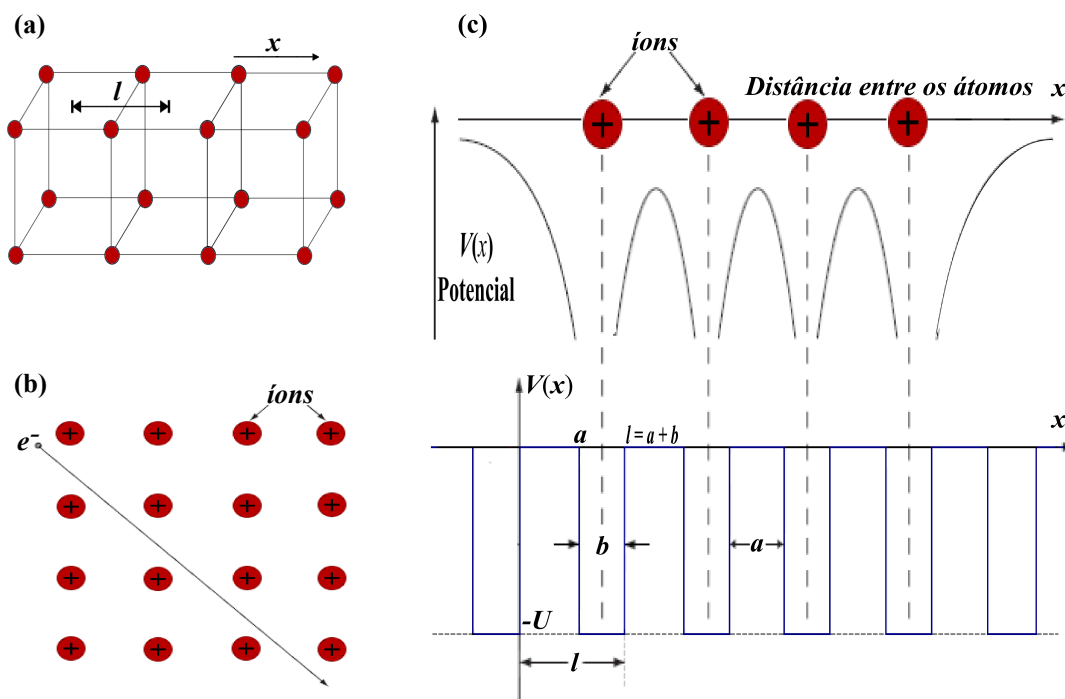


Figura 1.2: Em (a) um cristal de parâmetro de rede l . Figura modificada da referência [7]. (b) Um elétron movendo-se na rede cristalina. (c) (Em cima) Ilustração do potencial experimentado por um elétron, quando ele passa ao longo de uma linha através dos íons positivos. O potencial de um elétron no local do íon é zero e é máximo entre dois íons. (Em baixo) Ilustração de uma rede de degraus de potenciais retangulares unidimensional, sentido quando o elétron passa ao longo de uma linha através dos íons positivos que estão na rede cristalina. Figura adaptada da referência [11].

O potencial associado a um arranjo de átomos nos leva a pensar em uma *função periódica*, desprezando o efeito de superfície, em toda a rede, ou seja:

³O potencial $V(x)$ representa o efeito de todas as partículas do cristal, exceto o elétron.

$$V(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = V(\mathbf{x}) \quad (-\infty < \mathbf{x} < +\infty), \quad (1.2)$$

para todos os vetores de translação \mathbf{l} , neste modelo unidimensional⁴ [12, 10].

O hamiltoniano associado ao movimento do elétron na rede é:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(\mathbf{x}), \quad (1.3)$$

o que implica que neste potencial periódico na rede é:

$$\hat{H}(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = \hat{H}(\mathbf{x}) \quad (\forall \mathbf{x}), \quad (1.4)$$

Vamos definir o *operador de translação aplicado a uma função $f(\mathbf{x})$ por*

$$\hat{T}_{\mathbf{l}}f(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x} + \mathbf{l}). \quad (1.5)$$

Seja $\psi(\mathbf{x})$ um *estado estacionário* de \hat{H} com energia E [10]:

$$\hat{H}(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x}) = E\psi(\mathbf{x}). \quad (1.6)$$

Pela **Equação (1.5)** aplicada a função $\hat{H}(\mathbf{x})f(\mathbf{x})$ [10], temos

$$\hat{T}_{\mathbf{l}}\hat{H}(\mathbf{x})f(\mathbf{x}) = \hat{H}(\mathbf{x} + \mathbf{l})f(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = \hat{H}(\mathbf{x})f(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = \hat{H}(\mathbf{x})\hat{T}_{\mathbf{l}}f(\mathbf{x}) \quad \forall f, \quad (1.7)$$

o hamiltoniano ($\hat{H}(\mathbf{x})$) é invariante em relação a translação, ou seja

⁴Sabemos que não existe, em um cristal, uma periodicidade perfeita e que esta hipótese é apenas uma idealização. Um cristal real sempre contém impurezas e, mesmo em um puro há uma probabilidade proporcional à temperatura de se ter íons mal posicionados quebrando assim a simetria de translação [6, 12]. Os íons não são estacionários, os mesmos vibram o tempo todo em suas posições de equilíbrio.

$$\left[\hat{T}_l, \hat{H}(\mathbf{x}) \right] f(\mathbf{x}) = 0 \quad \forall f(\mathbf{x}), \quad (1.8)$$

\hat{T}_l é um comutador, o que implica

$$\left[\hat{T}_l, \hat{H}(\mathbf{x}) \right] = 0. \quad (1.9)$$

A **Equação (1.9)** terá um conjunto completo de autofunções em comum, pela condição necessária e suficiente dos operadores \hat{T}_l e $\hat{H}(\mathbf{x})$. Então, pode-se ter estados estacionários escolhidos como autofunção de \hat{T}_l [10],

$$\hat{T}_l \psi(\mathbf{x}) = \lambda \psi(\mathbf{x})$$

$$\hat{H}(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x}), \quad (1.10)$$

onde λ é um autovalor e precisa ser real (\hat{T}_l não é um observável) [10].

Pela definição de \hat{T}_l , isso resulta em

$$\psi(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = \lambda \psi(\mathbf{x}) \quad (\forall \mathbf{x}). \quad (1.11)$$

Mas, pela condição de normalização, deve-se ter [10]:

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{x} + \mathbf{l})|^2 dx = |\lambda|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{x})|^2 dx, \quad (1.12)$$

tomando ($\mathbf{x} + \mathbf{l} = \mathbf{x}'$), obtemos

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{x}')|^2 dx = |\lambda|^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{x})|^2 dx, \quad (1.13)$$

o que resulta em $|\lambda|^2 = 1$, permitindo, portanto, escrever λ como um *fator de fase* [10]:

$$\lambda \equiv \exp [ik\mathbf{l}], \quad (1.14)$$

onde k é real e é definido por esta relação e pela **Equação (1.11)** [10].

Definindo $u_k(\mathbf{x})$ por

$$\psi(\mathbf{x}) \equiv \exp [ik\mathbf{x}] u_k(\mathbf{x}), \quad (1.15)$$

as **Equação (1.11)** e **Equação (1.14)** resulta

$$\psi(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = \exp [ik(\mathbf{x} + \mathbf{l})] u_k(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = \exp [ik\mathbf{l}] \psi(\mathbf{x}) = \exp [ik(\mathbf{x} + \mathbf{l})] u_k(\mathbf{x})$$

$$u_k(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = u_k(\mathbf{x}). \quad (1.16)$$

As **Equação (1.15)** e **Equação (1.16)** é um caso unidimensional, restrito, do *teorema de Bloch*. Elas mostram que os estados estacionários do elétron num potencial periódico ($-\infty < \mathbf{x} < \infty$), $\exp [ik\mathbf{x}]$ é uma função de onda plana e $u_k(\mathbf{x})$ é uma *função de Bloch*, que tem periodicidade da rede cristalina ($u_k(\mathbf{x}) = u_k(\mathbf{x} + \mathbf{l})$) e descreve o comportamento da função de onda dentro de uma célula unitária [8, 10]. Logo, o elétron fica "livre" no sentido de está *deslocalizado*: existe a probabilidade do mesmo ser encontrado no entorno de cada unidade de rede (sítio). a relação $\psi(\mathbf{x} + \mathbf{l}) = \exp [ik\mathbf{l}] \psi(\mathbf{x})$ mostra que $k\mathbf{l}$ é a defasagem entre duas unidades vizinhas da rede [10].

Com a utilização do teorema de Bloch, percebeu-se uma característica muito importante dos cristais: a presença do potencial periódico gerado pela rede cristalina é responsável pelo aparecimento de bandas de energias contínuas e finitas e estas bandas não ocorrem apenas para o estado fundamental, mas também para outros estados do sistema [7]. Observa-se que os níveis de energia vão para $\sim 10^{46}$ níveis quando se tem $N \sim 10^{23}$

cm^{-3} átomos. Os elétrons mais externos estão ligados fracamente com os núcleos dos átomos e passam a transitar pela rede cristalina sem muita dificuldade [7, 8].

Quando os semicondutores se encontram a uma temperatura absoluta de $T = 0 \text{ K}$, todas as bandas de energia dos átomos, até a mais externa, denominada "banda de valência", são preenchidas pelos elétrons e a região (estados) onde o elétron não pode transitar denominada "gap", "banda proibida" ou "lacuna", **Figura 1.3 (a)**.

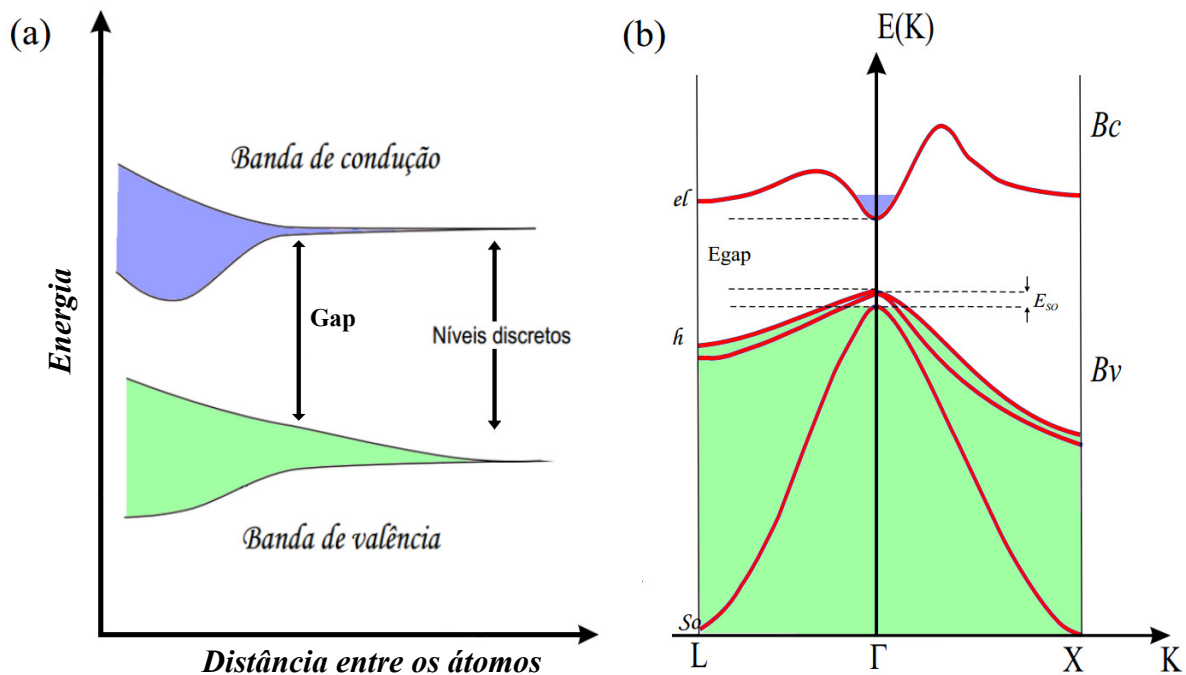


Figura 1.3: (a) Banda de condução e valência, a $T = 0 \text{ K}$, devido a aproximação de um grande número de átomos em um sólido semiconductor. (b) Bandas de energia em um semiconductor GaAs. As regiões hachuradas mostra a ocupação dos elétrons com $T > 0 \text{ K}$. Figuras modificadas da referência [2].

Se os átomos do material tiverem um ganho de energia, como por exemplo, um aumento na temperatura do material, os elétrons são excitados e ganham energia suficiente para passar para a banda seguinte, onde não há elétrons, chamada "banda de condução", a que é responsável por contribuir para a condutividade do material, **Figura 1.3 (b)**. Quando um elétron passa para a banda de condução, o mesmo deixa um espaço na banda de valência, denominado buraco, que possui uma carga positiva. Como temos um número contínuo e finito de portadores de cargas na camada de valência, o espaço (buraco) deixado

pelo elétron é ocupado pelo elétron vizinho. O *gap* de energia nos semicondutores são valores pequenos, dessa forma, estes materiais possuem condutividade significativa em temperatura ambiente [7]. Na **Figura 1.4 (a)** e na **Figura 1.4 (b)** temos uma estrutura cristalina do semiconductor GaAs (Arseneto de gálio) e a estrutura real das bandas de energia mostrando diferentes direções do vetor de onda k , respectivamente [2].

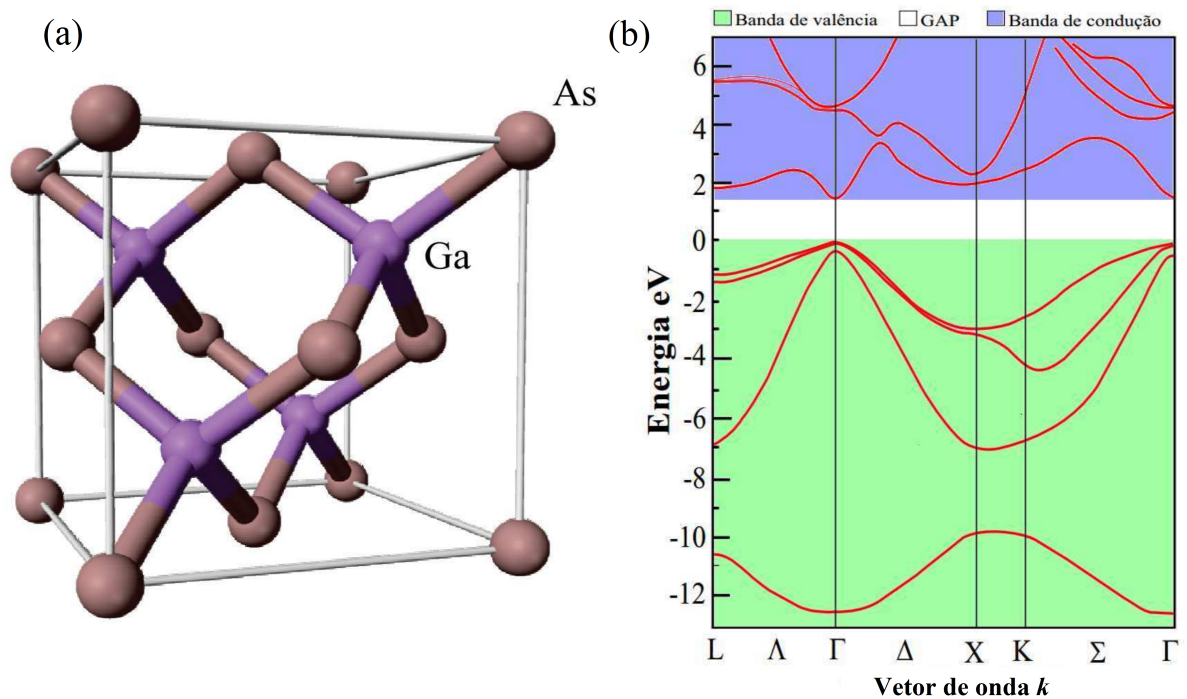


Figura 1.4: (a) Estrutura cristalina do semiconductor GaAs. (b) Estrutura de bandas de energia do GaAs. Figuras modificadas da referência [2].

1.4 Sistemas semicondutores de baixa dimensão

Quando juntamos dois ou mais tipos diferentes de materiais semicondutores, criamos as *heterojunções* ou *heteroestruturas*. Na **Figura 1.5 (a)** temos uma heteroestrutura de dois compostos semicondutores AlAs (Arseneto de Alumínio) e GaAs (Arseneto de Gálio). Na **Figura 1.5 (b)** temos um esquema de uma heteroestrutura com AlAs/GaAs com valores distintos de gaps.

Estas heterojunções quando não estão com suas bandas de energia alinhadas, distân-

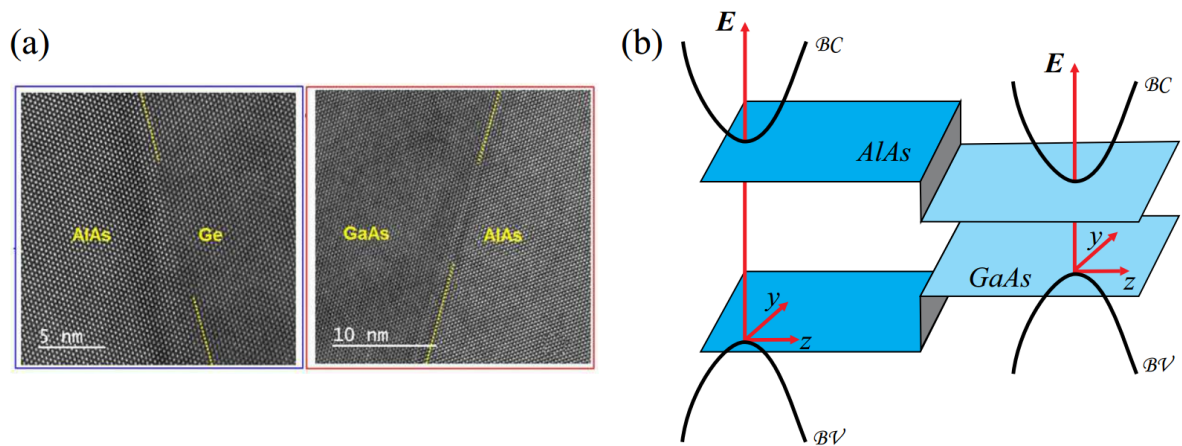


Figura 1.5: (a) Micrografia feita pela microscopia eletrônica de transmissão (MET) de uma heteroestrutura AlAs/GaAs retirado da referência [14]. (b) Modelo esquemático de uma heteroestrutura entre dois semicondutores com valores diferentes de gaps, formando degraus de potencial para o elétron na banda de condução e para o buraco na banda de valência [2].

cias interatômicas defasadas, cria degraus (barreira) de potencial para o elétron na banda de condução e, isso limita o movimento do elétron na rede cristalina, para o buraco cria-se um poço de potencial de forma que elétrons e buracos situam-se em regiões diferentes do espaço [2]. Esta configuração, com barreira para o elétron e poço para o buraco, é chamada de heteroestruturas tipo - II, **Figura 1.6 (b)**, em outras palavras a banda de valência e de condução do material B são mais altas (ou mais baixas) do que as do material A, de tal forma que E_c (energia potencial da banda de condução) e E_v (energia potencial da banda de valência) possuem sinais opostos. Quando temos o alinhamento das bandas de energia de forma a criar um poço de potencial para os elétrons e para os buracos, esta heteroestrutura é chamada de tipo - I, ou seja, o alinhamento ocorre quando o material B tem uma lacuna de banda menor do que A e está alinhado de modo que fica dentro da lacuna de banda do material A. Ou seja, $E_c > 0$ e $E_v > 0$, conforme mostrado na **Figura 1.6 (a)** [7, 13].

Na **Figura 1.6 (a)** mostra o potencial de confinamento do elétron (banda de condução) e buraco (Banda de valência) em um poço de potencial. Nesta mesma figura podemos utilizar esta configuração de confinamento para um poço quântico, considerando toda a configuração da heteroestrutura tipo - I, e para o fio quântico se utilizará o tipo - I,

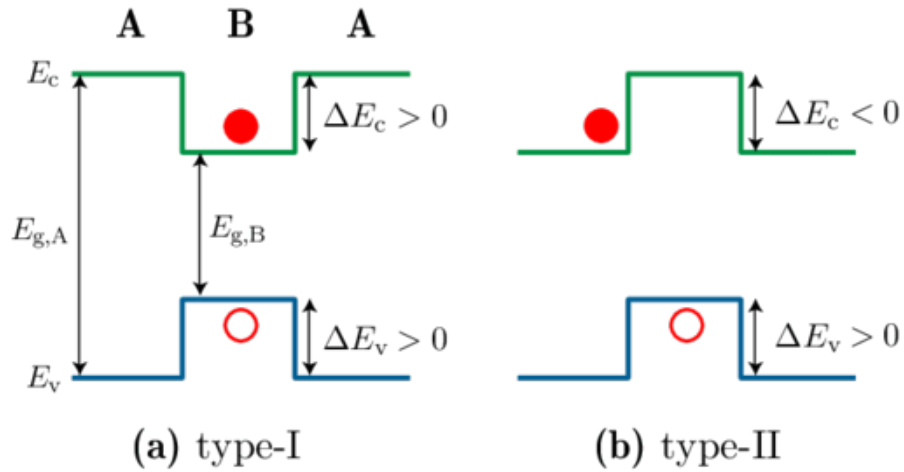


Figura 1.6: Heterojunção com material semiconductor A fazendo um "sanduíche" no material semiconductor B. A bolinha preenchida em vermelho é o elétron e o círculo em vermelho o buraco. Para (a) tipo-I, (b) tipo-II [13].

fazendo algumas modificações: desconsiderando o material A que está do lado esquerdo do material B e começando a heteroestrutura trocando de lugar o material B e colocando no lugar dele o material A, que estava a sua direita inicialmente, e assim teria-se uma configuração de confinamento com o material A tendo agora um gap menor que o material B, que está agora a direita do material A. A diferença entre os gaps para o tipo - I de dois semicondutores é descrito como:

$$E_{g,A} = E_{g,B} + \Delta E_c + \Delta E_v \quad \Rightarrow \quad E_{g,A} - E_{g,B} = \Delta E_c + \Delta E_v, \quad (1.17)$$

onde ΔE_c e ΔE_v são, respectivamente, o potencial que confina os elétrons e o potencial que confina os buracos. $E_{g,A}$ é o gap do material que forma a barreira da estrutura e $E_{g,B}$ o gap do material que forma a região do poço [2].

O potencial que confina os elétrons (ΔE_c) e buracos (ΔE_v) pode ser obtido por meio da razão [8]:

$$\frac{\Delta E_c + \Delta E_v}{\Delta E_c + \Delta E_v} = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v} + \frac{\Delta E_v}{\Delta E_c + \Delta E_v}, \quad (1.18)$$

onde será definido:

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{\Delta E_c + \Delta E_v} \quad (1.19)$$

$$Q_v = \frac{\Delta E_v}{\Delta E_c + \Delta E_v}, \quad (1.20)$$

utilizando a **Equação (1.17)** na **Equação (1.19)** e na **Equação (1.20)** , obtemos

$$Q_c = \frac{\Delta E_c}{E_{g,A} - E_{g,B}} \quad (1.21)$$

$$Q_v = \frac{\Delta E_v}{E_{g,A} - E_{g,B}}. \quad (1.22)$$

Assim, os potenciais de confinamento podem ser calculados:

$$\Delta E_v = Q_v(E_{g,A} - E_{g,B}) \quad (1.23)$$

$$\Delta E_c = Q_c(E_{g,A} - E_{g,B}), \quad (1.24)$$

onde as grandezas Q_v e Q_c são conhecidos como *band-off-set* de condução e *band-off-set* de valência, respectivamente. Estas grandezas são definidas em laboratório, já que são parâmetros do material [2]. Ao crescermos uma heterojunção o *band-off-set* dá o valor da fração da diferença $E_{g,A} - E_{g,B}$ que confina o elétrons Q_c e a fração que confina buracos Q_v , sendo que $Q_c + Q_v = 1$ [2].

As heteroestruturas semicondutoras, como pontos, fios, anéis quânticos e poços quânticos, tem tido ultimamente várias possibilidades de nanofabricação e são peças fundamentais para inúmeros artigos publicados desde a década de 70 [15].

Como já foi discutido, se crescer uma heterojunção com dois tipos de semicondutores diferentes de forma que suas bandas de energia estejam desalinhadas, criam-se potenciais de confinamento para os portadores de carga. As bandas de energia ficam distantes com diferentes valores de gaps e, devido a isso, os elétrons tendem a ficar no potencial que é menor [8].

O confinamento de portadores podem ocorrer em uma, duas ou três dimensões, conforme mostra a **Tabela 1.1**, onde se mantém a regra matemática $D_l + D_c = 3$. No sistema quântico tipo *bulk*, os portadores de carga podem se movimentar em todas as direções ($D_l = 3$) sem nenhum grau de confinamento ($D_c = 0$). No poço quântico, os portadores estão confinados na direção de crescimento da heteroestrutura ($D_c = 1$) e podem se movimentar ($D_l = 2$) no plano do poço quântico. Em fios quânticos, os portadores estão confinados no plano ($D_c = 2$) do fio e podem se movimentar ($D_l = 1$) na direção do eixo de crescimento do fio. No sistema de pontos quânticos, os mesmos estão confinados em todas as direções ($D_c = 3$) e não possuem grau de liberdade ($D_l = 0$) [2].

Sistemas Quânticos	D_l	D_c
Bulk	3	0
Poço Quântico	2	1
Fio Quântico	1	2
Ponto Quântico	0	3

Tabela 1.1: Sistemas de dimensionalidade reduzida e seus respectivos números de graus de liberdade D_l e de direções de confinamento D_c .

Os portadores de carga apresentam diferentes relações entre energia-momento, na direção de confinamento, o que resulta em densidade de estado completamente nova, em comparação com o caso *bulk*, conforme a **Figura 1.7**. Conforme a dimensionalidade é reduzida, a densidade de estado deixa de ser contínua, ou quase-contínua, e se torna quantizada. Em pontos quânticos, os portadores ocupam apenas um conjunto restrito

de níveis de energia, como ocorre com elétrons em um átomo, e por este motivo, pontos quânticos são chamados de átomos artificiais. Vale lembrar que nessa heteroestrutura semiconductor (ponto quântico) existem centenas de milhares de átomos [2].

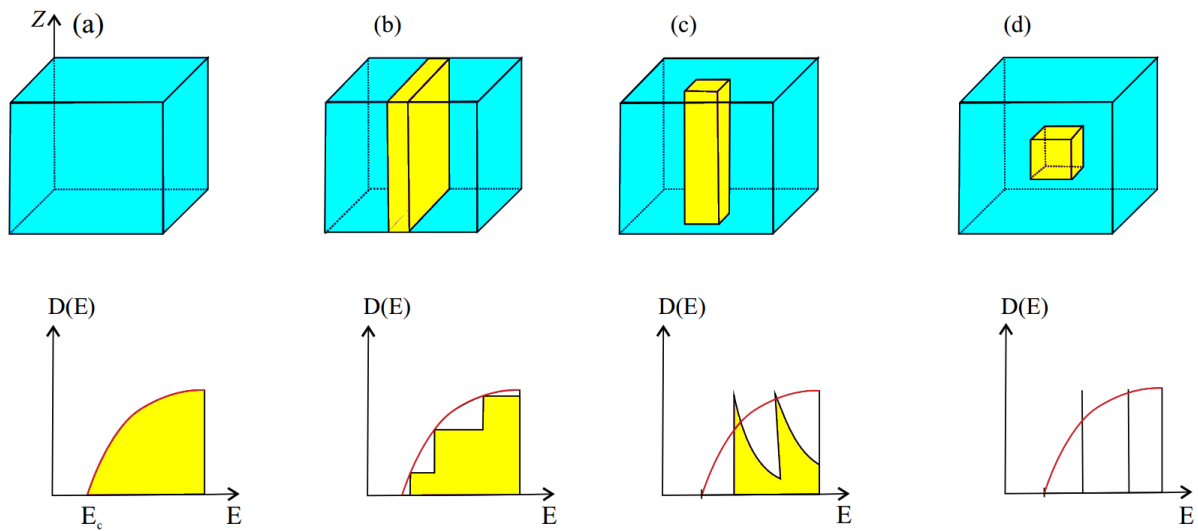


Figura 1.7: (Em cima) Morfologia esquemática do confinamento quântico e da (em baixo) densidade de estados $D(E)$ em função da energia E dos elétrons confinados em diferentes dimensionalidades: (a) bulk, (b) um poço quântico, (c) fio quântico e (d) ponto quântico. A linha vermelha representa a densidade de estados para o elétron na banda de condução. Figura modificada da referência [2].

Neste trabalho temos por objetivo estudar propriedades de transporte em canais porosos com diferentes larguras de canais e investigar o processo de espalhamento de elétrons nestes canais. O modelo teórico usado se baseia na propagação de um pacote de onda gaussiano na banda de condução, através da solução numérica da Equação de Schrödinger. Esta monografia está organizada em 5 capítulos.

No capítulo 2, é apresentado o modelo teórico utilizado no trabalho, abordando a ferramenta matemática que utilizaremos que é o método *split-operator*, que consiste na separação de operadores quânticos, e permite o cálculo dos estados quânticos em sistemas de baixa dimensionalidade. Além disso é discutido a aproximação da massa efetiva que é utilizada pra solucionar numericamente a Equação de Schrödinger dependente do tempo para um cristal, visto nas seções de estruturas de bandas e no teorema de Bloch do capítulo

1.

No capítulo 3, é mostrado o sistema quântico abordado no trabalho. Se utilizará fios quânticos semicondutores porosos através de canais quânticos com diferentes larguras de canal, afim de estudar o espalhamento de elétrons, em diferentes larguras de canais com diferentes energias para o pacote de onda gaussiano. A heteroestrutura utilizada foi a de InAlAs/InGaAs.

No capítulo 4 é discutido os resultados obtidos neste canal poroso para a Transmissão (T), Reflexão (R) e a Densidade de Probabilidade de Corrente (J) para diferentes larguras de canal e de energias do pacote de onda gaussiano. Além de mostrar as propagações do pacote de ondas para diferentes larguras de canais.

Por fim, as conclusões e perspectivas do trabalho são descritas no capítulo 5.

Modelo Teórico

Diferentes sistemas com baixa dimensionalidade, confinam os elétrons e os buracos quantizando seus movimentos nessas heteroestruturas. Desta forma, o estudo dos níveis de energia e dos estados quânticos destas partículas são importantes para entendermos as propriedades eletrônicas, ópticas e de transporte nessas heteroestruturas [2]. Então foram desenvolvidos vários métodos numéricos com diferentes aproximações com o objetivo de estudar os estados quânticos das heteroestruturas. A teoria da massa efetiva é a aproximação mais usada na literatura para heteroestruturas semicondutoras, devido a estas heteroestruturas possuírem potenciais periódicos, e a determinação dos estados quânticos é feita pelo cálculo da função envelope [2].

Será abordado a função envelope, pois ajuda na aproximação da massa efetiva quando temos perturbações, impurezas, defeitos, etc, na rede e quando consideramos que o tamanho do cristal é finito e temos elétrons confinados nos limites das heteroestruturas. Nos sistemas quânticos em que temos o confinamento dos portadores de carga é conveniente utilizar a solução da equação de Schrödinger no espaço real do que no espaço do momento para definirmos os estados quânticos confinados e as condições de contorno para a equação é definida pelo tamanho do sistema [2].

Neste capítulo será abordado o método numérico da solução da equação de Schrödinger com a aproximação da massa efetiva e do formalismo da função envelope, para heteroestruturas semicondutoras. O método consiste em calcular estados espacialmente confinados, utilizando coordenadas do espaço real. O operador de evolução temporal é escrito de forma a separar a ação do operador de energia cinética do operador de energia

potencial, método "*split-operator*". A evolução temporal de pacote de ondas possibilita, além da obtenção do espectro de energia, cálculo da condutividade elétrica e óptica, densidade local de estados, etc [2].

O uso da técnica *split-operator* escolhida neste trabalho é importante, "pois quando aplicada em sistemas cujo potencial se estende em um plano (x, y) , ser invariante com o tempo, e por apresentar também um baixo custo computacional, além de ter simples implementação" [2].

2.1 Teoria da massa efetiva

O conceito de massa efetiva é importante para o estudo de semicondutores, pois como visto no capítulo anterior, o movimento de portadores de cargas dentro de uma heteroestrutura semicondutora está sujeito a potenciais periódicos ao longo de seu movimento na rede e convém introduzir o conceito de massa efetiva. Este conceito tem um grande valor teórico, pois quando um elétron sai da banda de valência ¹ para a banda de condução, o mesmo deixa um "buraco" na banda de valência, que efetivamente funciona como uma partícula positiva, um portador de carga que também contribui para a produção de corrente elétrica, que não possui massa real ² e move-se dentro da rede igual o elétron [8].

Para descrevermos melhor estas heteroestruturas, devemos primeiro descrever como ocorre a interação entre elétrons e buracos quando submetidos a campos externos, como campos eletromagnéticos [7]. Partindo da segunda lei de Newton, $\mathbf{F} = d\mathbf{p}/dt = m \cdot a$, para o movimento de um elétron, com momento $\mathbf{p} = \hbar \cdot \mathbf{k}$, sob uma força externa \mathbf{F} , causada por um campo magnético, por exemplo, e desta forma conseguimos encontrar a massa do portador de certa forma, já que precisaremos de parâmetros conhecidos do material [7]. Segundo [7], "essa forma não é tão trivial, tendo em vista que o ideal seria esperar que a existência do potencial gerado pela rede cristalina pudesse ter um efeito mais drástico sobre o movimento do elétron". Seguindo então num raciocínio mais formal, temos que a

¹"Entrando na banda de condução o elétron não está completamente livre para produzir uma corrente eletrônica, e sim ligado ao buraco da banda de valência por meio de interação Coulombiana. O par de partículas elétron-buraco recebe o nome de exciton" [8].

²Sob ação de campos (forças) externos apresentam massa real igual à sua massa efetiva.

velocidade de grupo $v_g = \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}}$ e a energia sendo $\mathbf{E} = \hbar \cdot \omega$ [7], multiplicando um número de onda infinitesimal ($\frac{\partial}{\partial \mathbf{k}}$) em ambos os lados da equação da energia, obtemos

$$\frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{k}} = \hbar \cdot \frac{\partial \omega}{\partial \mathbf{k}} \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial \mathbf{k}} = \hbar \cdot v_g. \quad (2.1)$$

Sabemos que \mathbf{F} e \mathbf{E} estão relacionados, pode-se chegar nessa relação usando a equação da energia cinética, deriva-se em relação a posição:

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{E}}{dx} &= \frac{d}{dx} \left(\frac{m \cdot v^2}{2} \right), \text{ onde } d(v^2) = 2v dv, \text{ e } v = \frac{dx}{dt} \Rightarrow \frac{d\mathbf{E}}{dx} = \frac{2m}{2} \frac{dx}{dt} \frac{dv}{dx} \\ &\Rightarrow \frac{d\mathbf{E}}{dx} = m \frac{dv}{dt} \Rightarrow \frac{d\mathbf{E}}{dx} = m \cdot a \Rightarrow \frac{d\mathbf{E}}{dx} = \mathbf{F}, \end{aligned} \quad (2.2)$$

e temos a relação $d\mathbf{E} = \mathbf{F} \cdot dx$, portanto, $\mathbf{F} \cdot dx = \hbar \cdot v_g \cdot d\mathbf{k}$. Da definição de velocidade, $dx = v_g \cdot dt$, temos

$$\mathbf{F} = m^* \cdot a = \hbar \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t}, \quad (2.3)$$

onde $\hbar \cdot \mathbf{k}$ é o momento da partícula, mostrando que a forma geral da segunda lei de newton é preservada [7]. Continuando nessa linha de raciocínio, encontramos a aceleração $a = dv_g/dt$ e utilizaremos a **Equação (2.1)** e multiplicando por um tempo infinitesimal ($\frac{\partial}{\partial t}$) em ambos os lados da equação, obtendo

$$a = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t \partial \mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t \partial \mathbf{k}} \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial \mathbf{k}} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial \mathbf{k}^2} \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} = \frac{\hbar \cdot a}{\partial^2 \mathbf{E} / \partial \mathbf{k}^2}, \quad (2.4)$$

dessa forma, encontra-se a relação de $\partial \mathbf{k} / \partial t$ e a aceleração a , na qual substituímos na **Equação (2.3)** e obtemos

$$\mathbf{F} = m^* \cdot a = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \mathbf{E} / \partial \mathbf{k}^2} \cdot a, \quad (2.5)$$

onde encontramos então a *massa efetiva* (m^*) sendo

$$m^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \mathbf{E} / \partial \mathbf{k}^2}. \quad (2.6)$$

Portanto, "apesar da rede cristalina não alterar a forma da variação do momento no tempo, ela muda a dependência da energia com o momento" [7].

Foi assumido que \mathbf{E} depende apenas do módulo de \mathbf{k} . Só que "o comportamento de $\mathbf{E}(\mathbf{k})$ não é isotrópico e, em alguns casos, é fortemente dependente da direção k_α . Logo de uma forma mais exata, a massa efetiva deve ser tratada como uma grandeza tensorial" [7] dada por:

$$m_{\alpha,\beta}^* = \frac{\hbar^2}{\partial^2 \mathbf{E} / \partial k_\alpha \partial k_\beta}, \quad (2.7)$$

onde $k_{\alpha(\beta)}$ é a componente de \mathbf{k} na direção $\alpha(\beta)$.

De fato, a expressão teórica, **Equação (2.7)**, encontrada para a massa efetiva dos portadores de cargas, também são válidas para buracos (holes), e em geral, seus valores mudam conforme a estrutura cristalina, a periodicidade da rede e a composição química do material [15]. Dentro da chamada aproximação da massa efetiva, os elétrons na banda de condução de um material são considerados partículas livres em movimento, "onde a influência de qualquer potencial externo é adicionada ao efetivo Hamiltoniano do modelo contínuo e as interações com outros elétrons e íons da rede são todos levados em consideração pela introdução da massa efetiva" [15].

2.2 Aproximação da Função Envelope

O estudo da função envelope é um formalismo matemático que permite usar a aproximação da massa efetiva no comportamento de elétrons e buracos em uma rede cristalina, quando sujeito a perturbações. As perturbações, segundo [2], se deve a vários fatores como: "defeitos na rede, impurezas ou átomos dopantes, ou surgir devido a junção de camadas de materiais diferentes, ação de campos elétricos e/ou magnéticos externos ou campos internos provenientes de distorções da rede dependente do tempo".

A aproximação da função envelope se faz importante, pois foi imposto que a aproximação da massa efetiva considera uma estrutura cristalina de tamanho infinito, no entanto, segundo [2], "quando levamos em consideração que o sistema é limitado pelo tamanho do cristal, o elétron também é confinado nos limites da heteroestrutura, o que se dá pelo potencial $V(\mathbf{r})$ ". "Esta é a razão que torna o espectro de energia quantizado em níveis discretos na parte inferior da banda de condução" [8]. O Hamiltoniano usado na função envelope esta descrito abaixo

$$H = \frac{p^2}{2m^*} + V(\mathbf{r}). \quad (2.8)$$

2.3 Técnica de solução da equação de Schrödinger dependente do tempo: Propagação no Tempo Real

Foram desenvolvidas várias técnicas computacionais para se analisar a propagação de pacotes de ondas, só que algumas dessas técnicas são complicadas, pois, os mesmos requerem uma descrição completa da propagação, o que leva a se ter uma função de onda inicial ($\Psi(\mathbf{x}, t)$) do sistema de todos os **autoestados** e **autoenergias** correspondentes e para certos sistemas é extremamente complicado de se ter essas informações. Para sanar esse problema, uma das técnicas alternativas criada foi a *split-operator*.

Este método consiste principalmente em escrever o operador de evolução temporal

como um produto entre exponencial, ou seja, usa-se a expansão do operador evolução temporal e separa-se esse operador em termos cinéticos e potencial, evitando assim escrever o operador momento em termos de derivadas [15]. Este método foi investigado por Feit et. al. ([16] *apud* [15]) para determinar os autovalores e as autofunções da equação de Schrödinger, a fim de investigar semicondutores finitos na presença de um campo elétrico, sendo este campo, estático e externo ([17], [18] *apud* [15]). A técnica *split-operator* pode ser usada em sistemas que envolvem spin, sendo assim, utilizada em estudos do grafeno [18]. O problema principal é: como calcular um operador exponencial dado por uma soma de dois operadores que não comutam?

Fazendo uma expansão de série de Taylor de uma função de onda inicial $\Psi(\mathbf{r}, t_0)$ para tempos posteriores, $\Delta t = t - t_0$, em torno do tempo t_0 , temos:

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \Psi(\mathbf{r}, t) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \cdot \left(\frac{\partial^n \Psi}{\partial t^n} \right)_{t=t_0} \Delta t^n, \quad (2.9)$$

como se utilizará a equação de Schrödinger dependente do tempo, obtém-se:

$$i\hbar \cdot \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathbf{H} \Psi \Rightarrow \frac{\partial \Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} \cdot \mathbf{H} \Psi, \quad (2.10)$$

substituindo a **Equação (2.10)** na **Equação (2.9)** obtemos a função de onda com um avanço infinitesimal Δt , $\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$:

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{n!} \cdot \left(-\frac{i}{\hbar} \cdot \mathbf{H} \Delta t \right)^n \right] \cdot \Psi(\mathbf{r}, t_0). \quad (2.11)$$

Nota-se que equação acima é um somatório de uma expansão em série de uma função exponencial, então

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \cdot \hat{\mathbf{H}} \Delta t \right] \cdot \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.12)$$

Temos então, a função de onda para tempo posterior Δt dada por um operador de evolução temporal $\hat{U}(t, t_0)$. Então, o operador de evolução temporal no espaço real, da função de onda ($\Psi(\mathbf{r}, t)$) [21], é descrita como:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{U}(t, t_0) \cdot \Psi(\mathbf{r}, t_0). \quad (2.13)$$

Temos três formas de representar o operador de evolução temporal ([19] *apud* [15]):

- i - Se o Hamiltoniano não depender explicitamente do tempo, ou seja, se $V = V(\mathbf{r})$, então

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \cdot \hat{\mathbf{H}}(t - t_0) \right]; \quad (2.14)$$

- ii - Se o Hamiltoniano depender do tempo e se o comutador $[\hat{\mathbf{H}}(t), \hat{\mathbf{H}}(t')] = 0, \forall t e t'$, então

$$\hat{U}(t, t_0) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \cdot \int_{t_0}^t \hat{\mathbf{H}}(t') \cdot dt' \right]; \quad (2.15)$$

- iii - Se o comutador $[\hat{\mathbf{H}}(t), \hat{\mathbf{H}}(t')] \neq 0$, então:

$$\hat{U}(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \hat{\mathbf{H}}(t_1) \hat{\mathbf{H}}(t_2) \cdots \hat{\mathbf{H}}(t_n) \quad (2.16)$$

Para todos os sistemas investigados neste trabalho, o potencial é independente do tempo, $V = V(\mathbf{r})$. Assim, usamos o operador de evolução temporal dado pela **Equação (2.14)** e resolvemos a **Equação (2.13)** numericamente [15].

Agora, precisa-se reescrever a **Equação (2.12)**, de forma que não apareça derivadas. Então deve-se separar os termos da energia cinética (**T**) e do potencial (**V**) do Hamiltoniano. Porém, foi visto que não é tão simples, como só separar os termos $\exp[\hat{T} + \hat{V}] = \exp[\hat{T}] \cdot \exp[\hat{V}]$, pois, \hat{T} e \hat{V} são operadores que não comutam. Masuo Suzuki propôs uma solução aproximada para esse problema [20]:

$$\exp[\hat{A} + \hat{B}] = \exp[\hat{A}] \cdot \exp[\hat{B}], \quad (2.17)$$

se, apenas se $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$. M. Suzuki apresenta uma forma aproximada para o cálculo da exponencial de uma combinação linear de operadores que não comutam, usando uma aproximação $f_m(\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_q)$ [15], então

$$\exp\left[\varepsilon \sum_{j=1}^q \hat{A}_j\right] = f_m(\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_q) + \mathcal{O}(\varepsilon^{m+1}), \quad (2.18)$$

onde $\mathcal{O}(\varepsilon^{m+1})$ é um erro da ordem de (ε^{m+1}) . Assim, o cálculo dessa "aproximação" f_m pode ser útil quando temos ε muito pequeno.

As expressões para $f_m(\hat{A}_1, \hat{A}_2)$ e $f_m(\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3)$ para $m = 1, 2$ são dadas abaixo [21]:

$$f_1(\hat{A}_1, \hat{A}_2) = \exp[\varepsilon \cdot \hat{A}_1] \cdot \exp[\varepsilon \cdot \hat{A}_2], \quad (2.19)$$

$$f_2(\hat{A}_1, \hat{A}_2) = \exp\left[\frac{\varepsilon}{2} \cdot \hat{A}_1\right] \cdot \exp[\varepsilon \cdot \hat{A}_2] \cdot \exp\left[\frac{\varepsilon}{2} \cdot \hat{A}_1\right], \quad (2.20)$$

$$f_1(\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3) = \exp[\varepsilon \cdot \hat{A}_1] \cdot \exp[\varepsilon \cdot \hat{A}_2] \cdot \exp[\varepsilon \cdot \hat{A}_3], \quad (2.21)$$

$$f_2(\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3) = \exp\left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1\right] \exp\left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_3\right] \exp[\varepsilon \hat{A}_2] \exp\left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_3\right] \exp\left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1\right]. \quad (2.22)$$

Para manter, em todas as aproximações um erro na ordem de Δt^3 , iremos utilizar as aproximações da **Equação (2.19)** e a **Equação (2.22)**, onde as demonstrações encontram-se no **Apêndice A**.

Nota-se que a **Equação (2.19)**, **Equação (2.20)**, **Equação (2.21)** e **Equação (2.22)** a aplicação do operador exponencial de uma combinação linear de operadores, $\exp\left[\varepsilon \sum_{j=1}^q \hat{A}_j\right]$, foi dividida em sucessivas aplicações de exponenciais que dependem apenas de um dos operadores [21]. Dessa forma é possível "reduzir o processo de solução da equação de Schrödinger dependente do tempo a sucessivos processos de simples multiplicação e de solução de sistemas de equações lineares tri-diagonais" [21].

Podemos escrever o Hamiltonianos da seguinte forma:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}), \quad (2.23)$$

onde $\hat{P} = \frac{\hbar}{i} \nabla \Rightarrow \hat{P}^2 = -\hbar^2 \nabla^2$. Logo, o operador de evolução temporal, **Equação (2.14)**, pode ser escrito da seguinte forma:

$$\hat{U}(t + \Delta t, t) = \exp\left[-\frac{i \cdot (\hat{T} + \hat{V}) \cdot \Delta t}{\hbar}\right] = \exp\left[\Delta t \left(-\frac{i \cdot \hat{P}^2}{2m\hbar} - \frac{i \cdot \hat{V}(\mathbf{r})}{\hbar}\right)\right], \quad (2.24)$$

utilizando a **Equação (2.18)** e a **Equação (2.20)**, podemos reescrever a **Equação (2.24)** da seguinte forma

$$\hat{U}(t + \Delta t, t) = \exp\left[-\frac{i\hat{V}(\mathbf{r})\Delta t}{2\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\hat{P}^2\Delta t}{2m\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\hat{V}(\mathbf{r})\Delta t}{2\hbar}\right] + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (2.25)$$

Aplicando o valor da **Equação (2.25)** na **Equação (2.12)**, temos

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i\hat{V}(\mathbf{r})\Delta t}{2\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\hat{\mathbf{P}}^2 \Delta t}{2m\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\hat{V}(\mathbf{r})\Delta t}{2\hbar}\right] \Psi(\mathbf{r}, t) + \mathcal{O}(\Delta t^3). \quad (2.26)$$

O erro $\mathcal{O}(\Delta t^3)$ é da ordem de Δt^3 . Será utilizado tempos muito pequenos, então este termo será descartado. Então podemos escrever

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i\hat{V}(\mathbf{r})\Delta t}{2\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\hat{\mathbf{P}}^2 \Delta t}{2m\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i\hat{V}(\mathbf{r})\Delta t}{2\hbar}\right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.27)$$

Para calculamos a $\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$ é necessário discretizar esta equação separando cada operador sobre a função de onda [21]. Então calcularemos $\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$ em três passos

I - Será calculado $\xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$, como resultado para a primeira parte, ou seja

$$\xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i\hat{V}(\mathbf{r})\Delta t}{2\hbar}\right] \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.28)$$

O termo acima não passa de uma simples multiplicação do operador exponencial.

Então substituiremos a **Equação (2.28)** na **Equação (2.27)**, tendo assim

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i \cdot \hat{V}(\mathbf{r}) \cdot \Delta t}{2\hbar}\right] \exp\left[-\frac{i \cdot \hat{\mathbf{P}}^2 \cdot \Delta t}{2m\hbar}\right] \xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t). \quad (2.29)$$

II - Em segundo lugar, definimos uma função $\eta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$ como a solução para o operador de energia cinética sobre a função $\xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$,

$$\eta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp \left[-\frac{i \cdot \hat{\mathbf{P}}^2 \cdot \Delta t}{2m\hbar} \right] \xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t). \quad (2.30)$$

Ao definir o operador de momento $\hat{\mathbf{P}}^2 = \hat{\mathbf{P}}_x^2 + \hat{\mathbf{P}}_y^2 + \hat{\mathbf{P}}_z^2$, como as componentes do operador momento comutam $[\hat{\mathbf{P}}_x^2, \hat{\mathbf{P}}_y^2] = [\hat{\mathbf{P}}_x^2, \hat{\mathbf{P}}_z^2] = [\hat{\mathbf{P}}_z^2, \hat{\mathbf{P}}_y^2] = 0$, podemos escrever [21]

$$\eta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp \left[-\frac{i\hat{\mathbf{P}}_x^2 \Delta t}{2m\hbar} \right] \exp \left[-\frac{i\hat{\mathbf{P}}_y^2 \Delta t}{2m\hbar} \right] \exp \left[-\frac{i\hat{\mathbf{P}}_z^2 \Delta t}{2m\hbar} \right] \xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) \quad (2.31)$$

ou ainda,

$$\eta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp \left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \exp \left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \exp \left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) \quad (2.32)$$

Será resolvida a **Equação (2.32)** em três etapas [21]:

(a) Calcula-se $\alpha(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$, sendo

$$\alpha(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp \left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t). \quad (2.33)$$

(b) Calcula-se $\beta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$, sendo

$$\beta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp \left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right] \alpha(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t). \quad (2.34)$$

(c) Calcula-se $\eta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$, sendo

$$\eta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp \left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \beta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t). \quad (2.35)$$

Para aplicar o operador exponencial na **Equação (2.33)**, será utilizada uma forma aproximada, (demonstração no **Apêndice A**), descrita abaixo

$$\exp(\varepsilon\hat{A}) = \left[1 - \frac{\varepsilon\hat{A}}{2} \right]^{-1} \left[1 + \frac{\varepsilon\hat{A}}{2} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^4), \quad (2.36)$$

onde na **Equação (2.36)** ε é dado por Δt e \hat{A} por $\frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2}$, temos

$$\exp \left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] = \left[1 - \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]^{-1} \left[1 + \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \mathcal{O}(\Delta t^4). \quad (2.37)$$

Substituindo a **Equação (2.37)** na **Equação (2.33)**, temos

$$\alpha(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) \cong \left[1 - \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]^{-1} \left[1 + \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t). \quad (2.38)$$

Aplicando o operador $\left[1 - \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right]^{-1}$ em ambos os lados da **Equação (2.38)**, conforme abaixo

$$\left[1 - \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \alpha(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \left[1 + \frac{i\hbar\Delta t}{4m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t), \quad (2.39)$$

onde a equação deixa de usar o símbolo \cong .

Será feita uma substituição por $\mu = \frac{i\hbar\Delta t}{4m}$, então a **Equação (2.39)** torna-se

$$\alpha(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) - \mu \frac{\partial^2}{\partial z^2} \alpha(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) + \mu \frac{\partial^2}{\partial z^2} \xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t). \quad (2.40)$$

Temos agora que resolver numericamente a equação diferencial, **Equação (2.40)**.

Vale ressaltar que $\xi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$ é conhecido.

Para isso, vamos supor que o nosso sistema está definido dentro de uma caixa de dimensões L_x, L_y e L_z e discretizaremos os intervalos $0 \leq x \leq L_x, 0 \leq y \leq L_y$ e $0 \leq z \leq L_z$ em N_x, N_y e N_z pontos, respectivamente. Dessa forma, as distâncias entre um ponto e seus vizinhos mais próximos serão $\Delta x = L_x/N_x, \Delta y = L_y/N_y$ e $\Delta z = L_z/N_z$ [21].

Naturalmente, uma função $f = f(x, y, z)$, definida nesse intervalo, também será discretizada em $N_x \times N_y \times N_z$ pontos $f(x_i, y_j, z_k)$, ou simplesmente, $f_{i,j,k}$, onde $i = 1, 2, \dots, N_x, j = 1, 2, \dots, N_y$ e $k = 1, 2, \dots, N_z$ [21].

A **Figura 2.1** mostra o processo de discretização do espaço citado acima e de uma um função definida nesse espaço no caso unidimensional [21].

Assim, da teoria das diferenças finitas ([22] *apud* [21]) ([23] *apud* [21]), podemos escrever as derivadas de $f_{i,j,k}$ em relação a z [21], como

$$\frac{\partial}{\partial z} f_{i,j,k} = \frac{f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k-1}}{2\Delta z} + \mathcal{O}(\Delta z^2) \quad (2.41)$$

e

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} f_{i,j,k} = \frac{f_{i,j,k+1} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j,k-1}}{\Delta z^2} + \mathcal{O}(\Delta z^2). \quad (2.42)$$

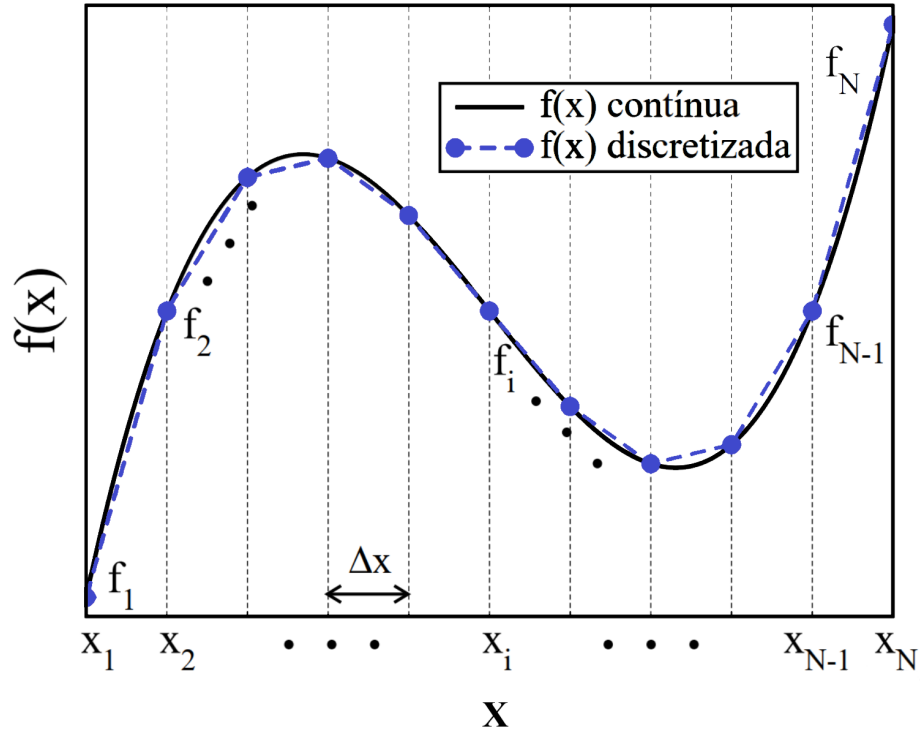


Figura 2.1: Discretização do espaço e de uma função definida nesse espaço no caso unidimensional. Figura modificada da referência [21].

As demonstrações das **Equação (2.41)** e **Equação (2.42)** são encontradas no **Apêndice A**.

Utilizando a **Equação (2.42)**, podemos reescrever a **Equação (2.40)** na sua forma discretizada como

$$-\lambda_z \alpha_{i,j,k-1} + (1+2\lambda_z) \alpha_{i,j,k} - \lambda_z \alpha_{i,j,k+1} = \lambda_z \xi_{i,j,k-1} + (1+2\lambda_z) \xi_{i,j,k} + \lambda_z \xi_{i,j,k+1} \quad (2.43)$$

onde

$$\lambda_z = \frac{\mu}{\Delta z^2} = \frac{i\hbar\Delta t}{4m\Delta z^2}. \quad (2.44)$$

Agora temos que aplicar as condições de contorno na direção de z [21]. Tem-se dois casos:

- i - Condições de contorno finitas (considera-se $\Psi(z \leq 0) = \Psi(z \geq L_z) = 0$);
- ii - Condições de contorno periódicas (considera-se $\Psi(z = 0) = \Psi(z = L_z)$).

Para as **condições de contorno finitas** na direção de z :

$$\alpha_{i,j,0} = \alpha_{i,j,N_z+1} = 0 \quad e \quad \xi_{i,j,0} = \xi_{i,j,N_z+1} = 0 \quad \text{para } \forall i, j. \quad (2.45)$$

Temos então para $k = 1$, a **Equação (2.43)**, fica

$$(1 + 2\lambda_z)\alpha_{i,j,1} - \lambda_z\alpha_{i,j,2} = (1 + 2\lambda_z)\xi_{i,j,1} + \lambda_z\xi_{i,j,2}, \quad (2.46)$$

e, para $k = N_z$, temos

$$-\lambda_z\alpha_{i,j,N_z-1} + (1 + 2\lambda_z)\alpha_{i,j,N_z} = \lambda_z\xi_{i,j,N_z-1} + (1 + 2\lambda_z)\xi_{i,j,N_z}. \quad (2.47)$$

Para as **condições de contorno periódicas** na direção de z :

$$\alpha_{i,j,0} = \alpha_{i,j,N_z}, \quad \alpha_{i,j,N_z+1} = \alpha_{i,j,1} \quad e \quad \xi_{i,j,0} = \xi_{i,j,N_z}, \quad \xi_{i,j,N_z+1} = \xi_{i,j,1} \quad p/ \forall i, j. \quad (2.48)$$

Temos então para $k = 1$, a **Equação (2.43)**, fica

$$(1 + 2\lambda_z)\alpha_{i,j,1} - \lambda_z\alpha_{i,j,2} - \lambda_z\alpha_{i,j,N_z} = (1 - 2\lambda_z)\xi_{i,j,1} + \lambda_z\xi_{i,j,2} + \lambda_z\xi_{i,j,N_z}, \quad (2.49)$$

e, para $k = N_z$, temos

$$-\lambda_z \alpha_{i,j,1} - \lambda_z \alpha_{i,j,N_z-1} + (1+2\lambda_z) \alpha_{i,j,N_z} = \lambda_z \xi_{i,j,1} + \lambda_z \xi_{i,j,N_z-1} + (1-2\lambda_z) \xi_{i,j,N_z} . \quad (2.50)$$

Será definido uma variável δ_z [21], tal que

$$\delta_z = \begin{cases} 0, & \text{se o sistema for finito ao de longo de } z. \\ 1, & \text{se o sistema for periódico ao de longo de } z. \end{cases} \quad (2.51)$$

Dessa forma as **Equações (2.43), (2.46), (2.47), (2.49) e (2.50)** podem ser escritas como produto de matriz, conforme abaixo:

$$\begin{pmatrix} (1+2\lambda_z) & -\lambda_z & 0 & \cdots & \cdots & -\delta_z \lambda_z \\ -\lambda_z & (1+2\lambda_z) & -\lambda_z & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & -\lambda_z & (1+2\lambda_z) & -\lambda_z & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -\lambda_z \\ -\delta_z \lambda_z & 0 & \cdots & \cdots & -\lambda_z & (1+2\lambda_z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_{i,j,1} \\ \alpha_{i,j,2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \alpha_{i,j,N_z-1} \\ \alpha_{i,j,N_z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} (1-2\lambda_z) & \lambda_z & 0 & \cdots & \cdots & \delta_z \lambda_z \\ \lambda_z & (1-2\lambda_z) & \lambda_z & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \lambda_z & (1-2\lambda_z) & \lambda_z & \ddots & \vdots \\ \vdots & 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \lambda_z \\ \delta_z \lambda_z & 0 & \cdots & \cdots & \lambda_z & (1-2\lambda_z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_{i,j,1} \\ \xi_{i,j,2} \\ \vdots \\ \vdots \\ \xi_{i,j,N_z-1} \\ \xi_{i,j,N_z} \end{pmatrix} \quad (2.52)$$

onde $i = 1, 2, 3, \dots, N_x$ e $j = 1, 2, 3, \dots, N_y$.

Então encontramos $\alpha(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$, resolvendo os $N_x \times N_y$ sistemas tri-diagonais de N_z equações e N_z incógnitas representadas acima [21].

A solução da matriz, **Equação (2.53)**, é uma equação de matriz tri-diagonal quando $\delta_z = 0$, ou tri-diagonal cíclica se $\delta_z = 1$, que podem ser resolvidas por várias sub-rotinas disponíveis e facilmente acessíveis [15, 21]. Para as matriz tri-diagonais, com $\delta_z = 0$, usa-se a sub-rotina TRIDAG do *Numerical Recipes* [21] e para as matrizes tri-diagonal cíclica, com $\delta_z = 1$, usa-se a sub-rotina CYCLIC, também do *Numerical Recipes* [15, 21].

Seguindo o mesmo raciocínio do cálculo de $\alpha(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$, **Equação (2.33)**, também pode-se calcular para $\beta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$, **Equação (2.34)**, e $\eta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$, **Equação (2.35)**.

III - Neste último passo, obtemos a função de onda final, $\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$, aplicando o último operador na função $\eta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t)$

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) = \exp \left[-\frac{i \cdot \hat{V}(\mathbf{r}) \cdot \Delta t}{2\hbar} \right] \eta(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t). \quad (2.53)$$

A dinâmica de um pacote de onda de elétrons em sistema quântico (ver **Tabela 1.1**) agora pode ser utilizada usando o método explicado neste tópico, utilizando as sub-rotinas citadas observando a evolução temporal da função de onda com um intervalo de tempo Δt [15].

As vantagens de usar o método *split-operator*, segundo "Sousa [15]", "são devido à sua simplicidade, velocidade de computação e porque é fácil de se adaptar para resolver problemas relacionados à dinâmica dos elétrons em sistemas de baixa dimensão, permitindo o uso de potenciais de absorção imaginários e o cálculo de estados próprios através da evolução no tempo imaginário".

Se não fosse utilizada a técnica *split-operator*, para estudar a dinâmica das funções de onda, e usássemos uma outra, como a da forma de Cayley para resolver, seria mais complicado, pois iria requerer um longo tempo computacional [15], enquanto a técnica

split-operator requer apenas uma solução de sistemas lineares com matrizes tri-diagonais levando a um curto tempo computacional [15].

Podemos, além da evolução temporal da função de onda, obter os autoestados do Hamiltoniano, segundo "Braga [21]", podemos "trocar a evolução no tempo real pela evolução no tempo imaginário e utilizar o processo de orto-normalização de Gram-Schmidt".

Fios Quântico Semicondutor

Heteroestruturas semicondutoras de baixa-dimensionalidade, na qual o confinamento quântico pode ser controlado, estão cada vez mais sendo estudados a medida que as dimensões das estruturas semicondutoras são reduzidas, o que a princípio não era levado em consideração, hoje sabe-se que possui uma grande influência nas propriedades de confinamento e transporte eletrônico [2].

Hoje o foco principal das pesquisas nesta área estão voltados, segundo "Almeida [2]", para a "busca por materiais e geometrias que consigam produzir dispositivos cada vez menores, eficientes e com baixo consumo de energia. Por outro lado, a redução nas dimensões provoca correntes indesejáveis no interior do dispositivo". Uma aplicação que ultimamente tem crescido é de estruturas semicondutoras porosas, com uma aplicação principalmente em placas fotovoltaicas, onde se busca encontrar estados confinados, propriedades ópticas, transições entre bandas, etc [24, 25].

Neste capítulo é feita uma descrição teórica do modelo utilizado no trabalho, mostrando o tipo de pacote onda usado bem como a equação da transmissão, reflexão, estados estacionários e probabilidade de corrente elétrica. É mostrado também o tipo de canal, as energias do pacote de onda dentro do canal e os tamanhos de largura de canal (L). O modelo teórico usado é baseado na solução da Equação de Schrödinger dependente do tempo através do método de *split-operator* e técnicas numéricas de discretização, mostradas no Capítulo 2. Este modelo é consistente com a aproximação da massa efetiva e com o formalismo da função envelope.

3.1 Descrição teórica do modelo

Os sistemas que se estudou neste trabalho são baseados em canais porosos formados pelos materiais InGaAs e InAlAs. O valor da massa efetiva e o potencial de confinamento (região verde) são, respectivamente, $m_e = 0.041m_0$ e 600 meV . Conforme pode ser observado na **Figura 3.1**, o valor do potencial muda abruptamente de 600 meV , fora do canal, para 0 meV , dentro do canal (região azul escuro). Os poros ("bolinhas cinzas" com diâmetros variados) que estão dentro do canal possuem um potencial de 600 meV . O material semiconductor InAlAs (Arseneto de Índio-Alumínio) é o material utilizado para confinar os portadores, pois possui um gap maior, este material faz um "sanduíche" do material InGaAs (Arseneto de Índio-Gálio) que é utilizado pra fazer o canal, que por sua vez possui um gap menor.

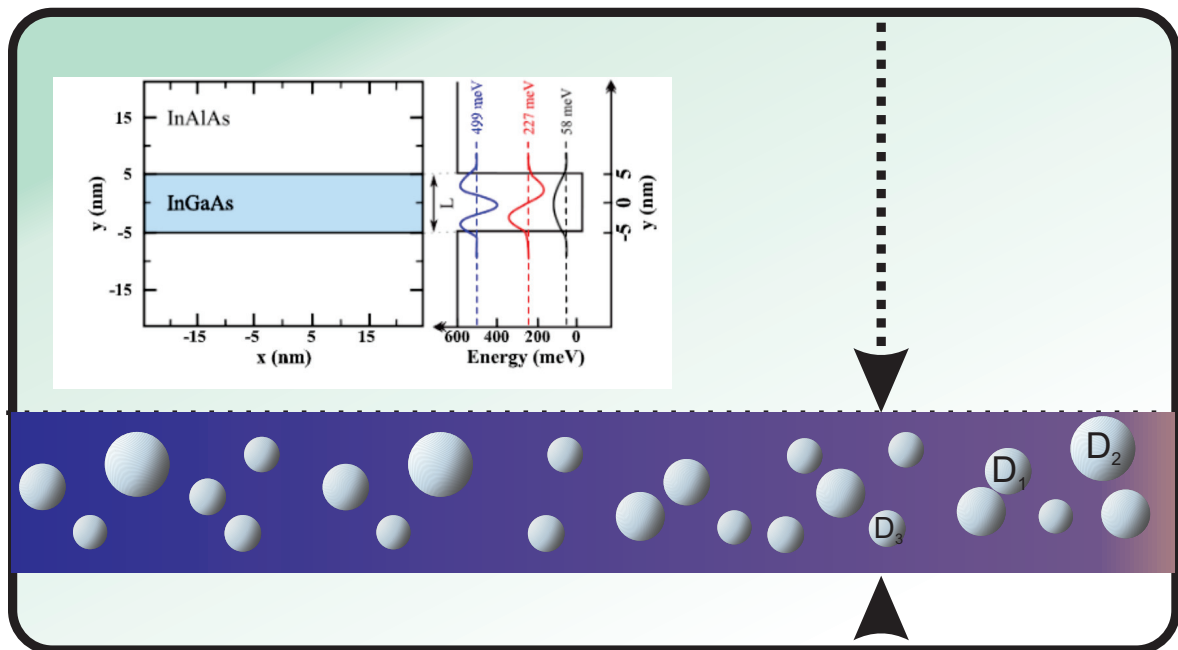


Figura 3.1: Perfil de potencial onde teremos diferentes larguras de canal (L) que está representada pela variação das setas. Os poros representado em cinza assumem diferentes diâmetros D_1 , D_2 e D_3 . O potencial fora do canal (região verde) vale 600 meV e este valor vale também para os poros e dentro do canal (região azul) o potencial é 0 meV . A figura acima do canal, a esquerda, representa o material semiconductor do sistema quântico estudado. fora do canal temos InAlAs e dentro do canal temos InGaAs. A direita, temos um gráfico que mostra auto-estados de um poço quântico, com potencial de confinamento $V_e = 600 \text{ meV}$, para uma largura de canal $L = 10 \text{ nm}$. Figura modificadas da referência [26].

A **Figura 3.2 (e)** exibe um canal contendo silício poroso com potencial de aplicação em placas fotovoltaicas [25]. Nas outras imagens são mostrados os processos de fabricação de filmes finos, podendo ser adicionado outro filme semicondutor de forma a criar uma heteroestrutura.

Na **Figura 3.2 (a)** tem-se inicialmente um substrato de silício e é iniciado por processo de anodização, surgindo duas camadas de porosidade, sendo uma com mais porosidade que outra. Na **Figura 3.2 (b)** é feita o processo de recozimento térmico do silício, onde camada de baixa porosidade recozida atua como uma boa camada de semente para deposição de camada epitaxial e de baixa porosidade como camada de separação [25]. Na **Figura 3.2 (c)** tem-se a fabricação de um dispositivo eletrônico heteroestruturado. E por último, na **Figura 3.2 (d)** tem-se a separação da camada epitaxial do substrato de silício inicial e a transferência para outro substrato, colando-o com uma camada adesiva e aplicando força mecânica [25].

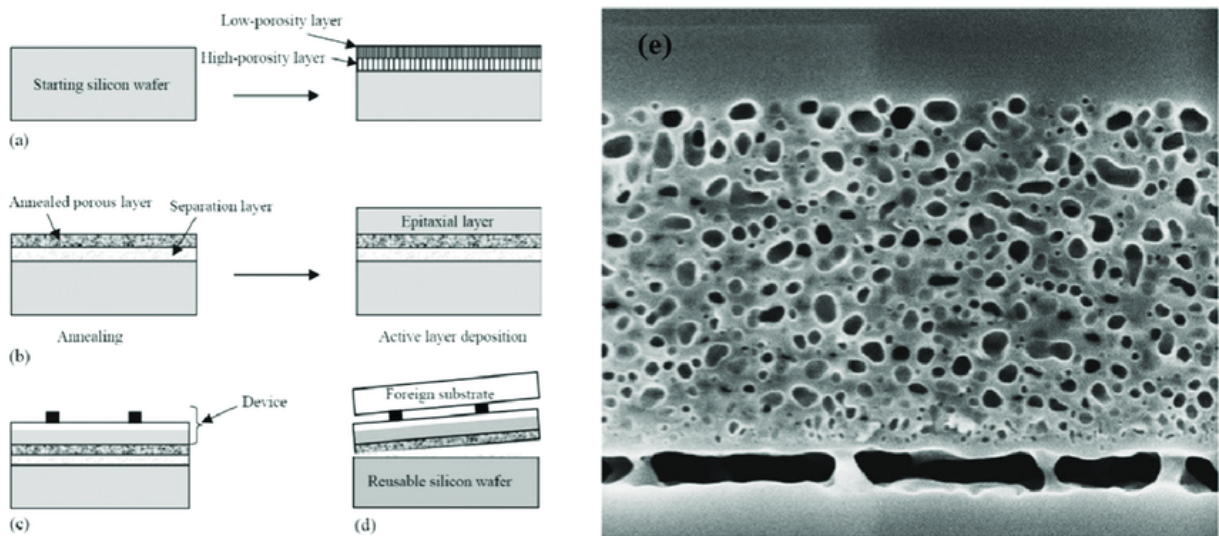


Figura 3.2: Em (a) temos a criação de camadas porosas pelo processo de anodização. (b) Processo recozimento térmico do silício tendo a camada de alta porosidade como separação e de baixa porosidade funciona como camada epitaxial. (c) Fabricação do dispositivo. (d) Separação da camada epitaxial do substrato de silício. (e) Material poroso de silício. Figuras retirada da referência [25].

Neste trabalho, será investigado espalhamento da nuvem eletrônica, o qual é simulado por meio de um pacote de ondas injetado na região do canal. A propagação do pacote

de onda se dá da esquerda para a direita no plano (x, y) , com energia cinética ε . É possível estudar o espalhamento de buracos (leves (lh) e pesados (hh))¹, conforme discutido anteriormente, alterando os valores da massa efetiva e do potencial de confinamento [2]. Esses parâmetros podem ser obtidos através das equações que está na **Tabela 3.1** abaixo [2].

Gap $E_g(eV)$	$0.36 + 0.63x + 0.43x^2$
lh^*/m_0	$0.026 - 0.056x$
m_{hh}^*/m_0	$0.41 - 0.1x$

Tabela 3.1: Parâmetros da liga semicondutora $Ga_xIn_{1-x}As$ [2].

A largura de canal analisado neste trabalho foram de $L = 10 \text{ nm}$, $L = 15 \text{ nm}$, $L = 20 \text{ nm}$, $L = 30 \text{ nm}$, $L = 40 \text{ nm}$ e $L = 50 \text{ nm}$. Para os valores da energia cinética do pacote de onda gaussiano foram de $\varepsilon_1 = 70 \text{ meV}$, $\varepsilon_2 = 140 \text{ meV}$ e $\varepsilon_3 = 180 \text{ meV}$. O sistema possui dimensões de $420 \times 420 \text{ nm} = 4200 \times 4200 \text{ \AA}$. O processo de propagação do pacote de onda ocorreu da seguinte forma: Criou-se o tamanho do canal (L) e depois foi colocado os poros, tudo na linguagem de programação FORTRAN. Para simplificação no tempo de cálculo computacional, utilizou-se três poros com diâmetros iguais a $D = 4 \text{ nm}$, sendo um no centro do canal, ponto $(0, 0)$, outro a esquerda $(-372, 88)$, em relação ao que está no centro e terceiro a direita $(372, -88)$ do que está no centro. Em seguida é colocado diferentes valores de energia cinética para o pacote de onda que inicia sua propagação a esquerda do canal em $x = -1100 \text{ \AA} = -110 \text{ nm}$.

Ao longo da direção y do canal, há estados discretos equivalentes aos estados estacionários de um poço quântico InGaAs/InAlAs, que é definido pela equação [2] abaixo:

$$E_n(k_x) = E_n^y + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_e^*}. \quad (3.1)$$

¹Neste trabalho não abordará o cálculo de buracos

Nesta equação, m_e^* é a massa efetiva do elétron e as auto-energias $E_n^y = \langle \phi_n(y) | H | \phi_n(y) \rangle$ são numericamente calculadas para um potencial de confinamento ($V_e = 600 \text{ meV}$) [2]. O cálculo das auto-energias estão baseados "na discretização numérica da equação de Schrödinger independente do tempo, ou na solução numérica da equação dependente do tempo" [2]. O pacote de onda é representado por uma combinação de uma função Gaussiana com uma onda plana [15]

$$\Psi(x, y, 0) = \exp \left[ik_0 x - \frac{(x - x^0)^2}{2\sigma_x^2} \right] \phi_0(y), \quad (3.2)$$

sendo $k_0 = \sqrt{2m_e \varepsilon} / \hbar$ o vetor de onda correspondente a energia cinética ε . A função $\phi_0(y)$ é a função de onda do estado fundamental na direção y e σ é a largura do pacote de ondas na direção x [2].

As probabilidades de transmissão \mathbf{T} e reflexão \mathbf{R} são calculadas através integração numérica da densidade de probabilidade de corrente \mathbf{J} , que neste caso é calculado no lado direito do canal, no ponto $(700, y)$. A reflexão é calculada no lado esquerdo do canal (entrada do sistema) no ponto $(-1500, y)$ e a transmissão calculada a direita do canal (saída do sistema) no ponto $(700, y)$. As equações [15] das mesma estão descritas abaixo

$$T = \int_0^\infty dt \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_R, y, t) \cdot dy, \quad (3.3)$$

$$R = - \int_0^\infty dt \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_L, y, t) \cdot dy, \quad (3.4)$$

a componente x da corrente de probabilidade é dada pela equação [15]

$$J_x = \frac{\hbar}{2im_e} \left(\Psi^* \frac{\partial \Psi}{\partial x} - \frac{\partial \Psi}{\partial x} \Psi^* \right). \quad (3.5)$$

As integrais **Equação (3.3)** e **Equação (3.4)** são calculadas numericamente em um intervalo de tempo ($5000 \text{ fs} = 5 \times 10^{-12} \text{ s}$), de forma que todo o pacote de onda que passar pelo ponto onde está J_x , ou seja, no ponto $(700, y)$, é calculado.

Segundo [15], o erro observado na soma $\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1$, apresentou um resultado numérico aproximado de 0,1%, o que demonstra que existe uma boa precisão nos resultados. A densidade de corrente que passa pelo canal, em função do tempo, é definida [2] por

$$J_T(x_i, y, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} J_x(x_i, y, t) \cdot dy, \quad (3.6)$$

Afim de evitar reflexões nas bordas do canal, segundo "Sousa [15]", "quando um pacote de ondas está se propagando em um sistema finito com uma *grid* discreta, para qualquer ponto fora da *grid*, ou localizada em suas bordas, a função de onda deve desaparecer" e afirma que, "uma possibilidade de contornar este problema é garantir que a função de onda nunca alcance o sistema em suas bordas". Em alguns sistemas quânticos, como em anéis quânticos, segundo "Sousa [15]", "o pacote de ondas se propaga em *loops* que levam a uma perda de informações conforme o tempo passa, devido a suas transmissões e reflexos na borda da *grid*". Para resolver este problema, foi introduzido um potencial imaginário proposto por Manolopoulos [27].

O potencial imaginário usado neste trabalho [15] é:

$$V_{im} = -iE_{min} \left(a\bar{x} - b\bar{x}^3 + \frac{4}{(c - \bar{x})^2} - \frac{4}{(c + \bar{x})^2} \right), \quad (3.7)$$

onde os coeficientes a , b e c são respectivamente

$$a = 1 - \frac{1}{c^3},$$

$$b = \left(1 - \frac{1}{c^3} \right) / c^2,$$

$$c = \int_0^\infty \frac{dz}{(1+z^2)^{3/4}} = \sqrt{2}K(1/\sqrt{2}),$$

onde k é definido como uma integral elíptica com argumentos $K(k) = F(\pi/2, k)$ ([28] *apud* [15]), resultando em $c = 2.62206$. E_{mim} é a energia mínima que pode ser considerada para o elétron, e pode ser escrito como ([29] *apud* [15])([27] *apud* [15])

$$E_{mim} = \frac{\hbar^2}{2m_e} \left[\frac{c}{2(x_2 - x_1)\delta} \right]^2, \quad (3.8)$$

para os pontos localizados entre x_1 e x_2 . O parâmetro δ conta para a precisão do potencial absorvente. Usa-se $\delta = 0.2$ para obter pequenas reflexões em x_1 [15]. A variável na \bar{x} , **Equação (3.7)**, tem dependência em x [15], e pode se escrito conforme abaixo

$$\bar{x} = 2k_{mim}\delta/(x - x_1), \quad (3.9)$$

onde $k_{mim} = \sqrt{2m^*E_{mim}/\hbar^2}$. A **Equação (3.9)** dá o ponto onde o potencial de absorção começa [15].

4.1 Propagação de pacotes de ondas em canal poroso

Os sistemas investigados neste trabalho consistem em estruturas quânticas planares, em que o movimento de elétrons está restrito a diferentes larguras de canal, sendo os valores: $L_{10} = 10 \text{ nm}$, $L_{15} = 15 \text{ nm}$, $L_{20} = 20 \text{ nm}$, $L_{30} = 30 \text{ nm}$, $L_{40} = 40 \text{ nm}$ e $L_{50} = 50 \text{ nm}$. Aqui por diante, iremos nos referir a estes sistemas pelas suas respectivas letras L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} . A dimensão total da estrutura é de $420 \times 420 \text{ nm} = 4200 \times 4200 \text{ \AA}$ e o potencial de absorção que estão nas bordas do canal têm largura de 24 nm .

O pacote de ondas é propagado da esquerda para direita, com energia cinética ε variando entre 70 e 180 meV , ou seja, $\varepsilon_1 = 70 \text{ meV}$, $\varepsilon_2 = 140 \text{ meV}$, $\varepsilon_3 = 180 \text{ meV}$ e $\varepsilon_0 = 180 \text{ meV}$ (1° estado excitado), que serão representados pelas letras ε_1 , ε_2 , ε_3 e ε_0 .

A **Figura 4.1** mostra os coeficientes de transmissão (linhas sólida preta) e reflexão (linhas pontilhadas vermelha) em função das energias cinéticas dos pacotes de ondas, para diferentes tamanhos de canal: L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} , além de mostrar a soma de $\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1$ (linhas tracejadas azul) desses sistemas. Uma visão geral dos resultados da transmissão, mostrados na **Figura 4.1**, indica, como é esperado, que a probabilidade de transmissão aumenta com o aumento da energia cinética do pacote de onda, independente do sistema considerado. As probabilidades de transmissão também aumentou a medida que as larguras do canal aumenta.

No sistema L_{10} , com largura de canal $L_{10} = 10 \text{ nm}$, o tamanho do canal afeta forte-

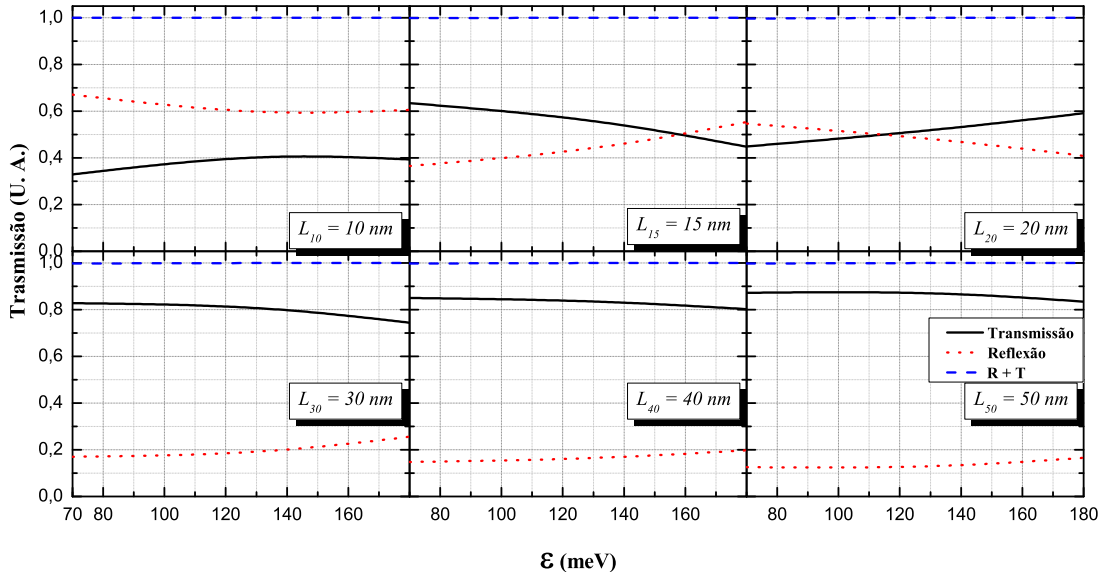


Figura 4.1: (Color online) Transmissão em função da energia do pacote de ondas, para valores da largura de canal L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} . As linhas sólidas preta indicam as transmissões, linhas pontilhadas vermelha indicam as reflexões e linhas tracejadas azul indicam $\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1$.

mente a probabilidade de transmissão. Para este sistema a probabilidade de transmissão é menor que a probabilidade de reflexão, sendo que a probabilidade de transmissão possui um valor de 32% e da reflexão com valor de 68% para ε_1 . Aumentando o valor da energia cinética, os valores chegam a 40% para a transmissão e 60% para reflexão. O que indica que para esta largura de canal, os poros ("as barreiras do sistema"), que estão no centro do canal, refletem maior parte do pacote de onda e transmite-se pouco do pacote para o outro lado da "barreira" (poros).

No sistema L_{15} , o aumento de 5 nm do canal em relação ao sistema L_{10} , afeta significativamente o valor da probabilidade de transmissão, tendo um valor de 64% e 36% para a reflexão para ε_1 . Para valores de ε_2 e ε_3 as transmissões são mais baixa em relação a ε_1 . Para ε_2 temos uma transmissão de 54% e 46% para reflexão. Enquanto para ε_3 a transmissão é 45% e 55% para reflexão. Isso mostra que para o valor de ε_1 , temos uma melhor propagação do pacote de onda no canal.

No sistema L_{20} , o aumento de 10 nm do canal em relação ao sistema L_{10} , temos uma transmissão melhor para energias maiores, como para ε_2 e ε_3 , em relação a ε_1 . A transmissão e a reflexão para ε_1 são, respectivamente, 45% e 55%. Para ε_2 , temos 53% para

a transmissão e 47% para a reflexão. Enquanto para ε_3 , temos 60% para a transmissão e 40% para a reflexão.

Para os sistemas L_{30} , L_{40} e L_{50} , temos transmissões maiores que reflexões para qualquer valor de ε . A **Tabela 4.1** mostra os valores das transmissões e reflexões dos sistemas.

Channel	Trans.	Reflection	Trans.	Reflection	Trans.	Reflection
	ε_1	ε_1	ε_2	ε_2	ε_3	ε_3
L_{10}	33%	67%	41%	59%	40%	60%
L_{15}	63%	37%	54%	46%	45%	55%
L_{20}	45%	55%	53%	47%	60%	40%
L_{30}	83%	17%	80%	20%	74%	26%
L_{40}	85%	15%	83%	17%	80%	20%
L_{50}	87%	13%	87%	13%	83%	17%

Tabela 4.1: Valores das transmissões e reflexões dos canais L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} para valores de ε_1 , ε_2 e ε_3 .

Analisando de forma geral, pode-se perceber que a transmissão é alta para canais grandes independentes do valor da energia cinética do pacote de onda. Para ε_0 , energia cinética de 180 *meV* para o 1° estado excitado, observa-se que a transmissão é alta para valores acima de L_{15} , conforme podemos observar também na **Figura 4.2**.

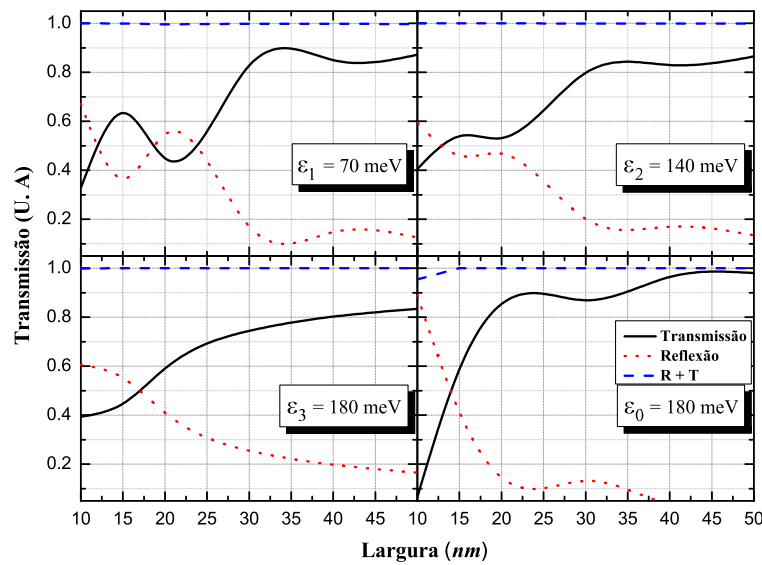


Figura 4.2: (Color online) Transmissão em função da largura do canal, para valores de ε_1 , ε_2 , ε_3 e ε_0 (1° estado excitado). As linhas sólidas preta indicam as transmissões, linhas pontilhadas vermelha indicam as reflexões e linhas tracejadas azul indicam $\mathbf{R} + \mathbf{T} = 1$.

A **Figura 4.3** mostra os resultados para a densidade de probabilidade de corrente em função do tempo. Na **Figura 4.3 (a)** temos a corrente de probabilidade para os canais L_{10} (linha tracejada vermelha), L_{30} (linha pontilhada azul) e L_{50} (linha sólida preta) com energia cinética $\varepsilon_1 = 70 \text{ meV}$. Esta figura mostra que para o valor de L_{10} , a probabilidade de corrente é baixa em relação a L_{30} e L_{50} . Os sistemas L_{30} e L_{50} possuem praticamente as mesma probabilidade de corrente. Isso ocorre devido ao canal L_{10} ter maior parte do pacote de onda refletido, enquanto que para o canal L_{30} e L_{50} o pacote de onda tem uma transmissão maior que a reflexão, conforme vista na **Tabela 4.1**.

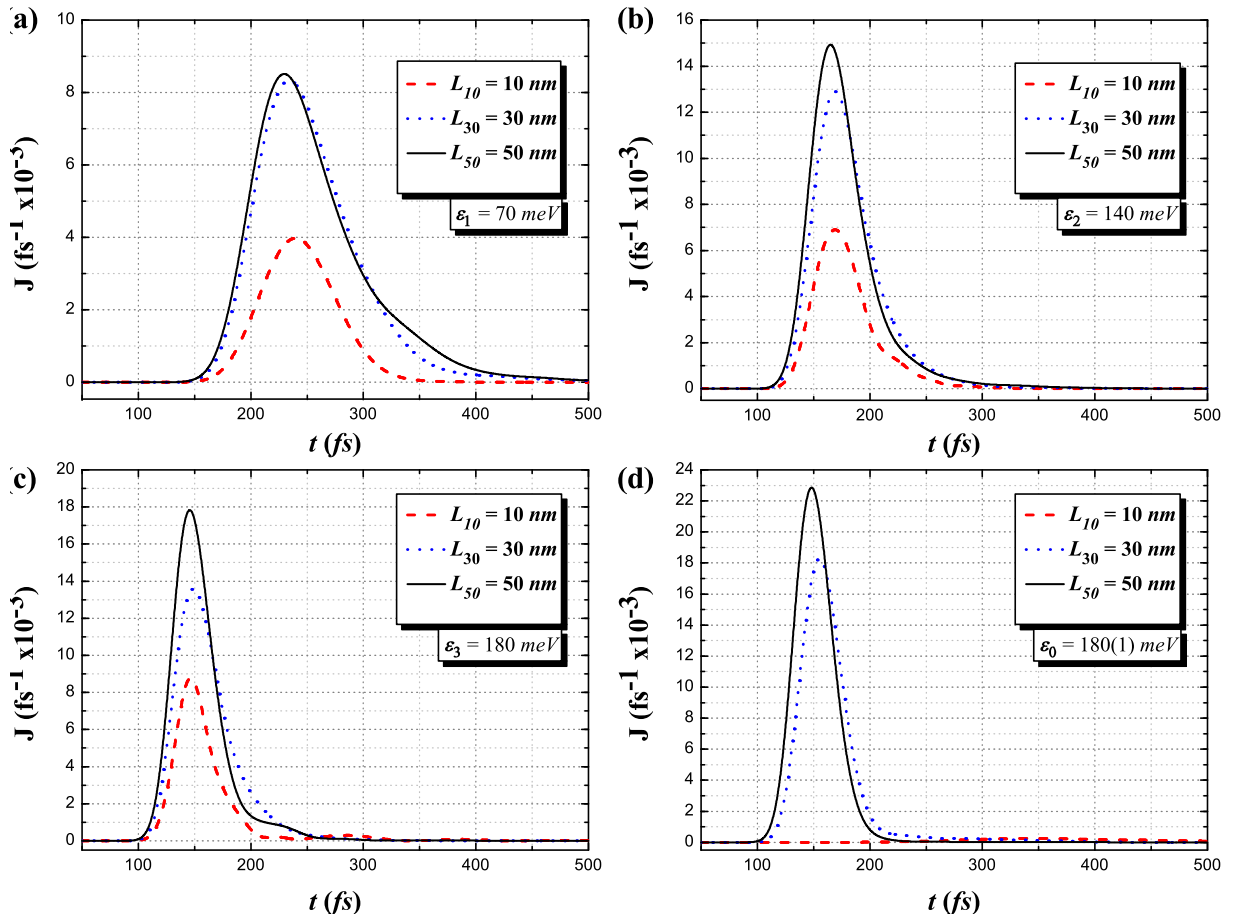


Figura 4.3: (Color online) Corrente de probabilidade em função do tempo. (a) Corrente de probabilidade para os canais L_{10} (linha tracejada vermelha), L_{30} (linha pontilhada azul) e L_{50} (linha sólida preta) com energia cinética $\varepsilon_1 = 70 \text{ meV}$. Em (b) e (c) tem-se a probabilidade de corrente para as mesmas larguras de canais que em (a), porém, com energia cinética, respectivamente igual a $\varepsilon_2 = 140 \text{ meV}$ e $\varepsilon_3 = 180 \text{ meV}$. Em (d) temos a densidade de corrente, para o pacote de onda se propagando no 1° estado excitado com energia cinética $\varepsilon_0 = 180 \text{ meV}$ para estes canais.

Na **Figura 4.3 (b)** temos que a probabilidade de corrente aumentou quando dobramos o valor da energia cinética. Temos ainda um valor baixo para L_{10} em comparação aos canais L_{30} e L_{50} . Isso também pode ser observado na **Figura 4.3 (c)** com energia cinética $\varepsilon_3 = 180 \text{ meV}$. Vemos agora uma diferença da probabilidade de corrente para L_{30} em relação a L_{50} . Na **Figura 4.3 (d)** a probabilidade de corrente é praticamente zero para L_{10} , isso significa quase todo o pacote de onda foi refletido pela barreira (poros). A medida que o canal aumenta, vemos que a probabilidade de corrente também aumenta para energia cinética, $\varepsilon_0 = 180 \text{ meV}$, no 1° estado excitado.

As probabilidades de correntes da **Figura 4.3**, demonstram concordância com as probabilidades de transmissão da **Figura 4.1**, **Figura 4.2** e com a **Tabela 4.1**, com relação a dependência da probabilidade de corrente com a energia ε . Desta forma, quanto maior for a energia cinética do pacote de onda, maior será o pico de probabilidade de corrente calculada na saída do canal, e conseqüentemente, o tempo que o pacote de onda gasta para sair do canal é menor.

A **Figura 4.4** mostra a contribuição de cada sub-banda de energia no processo de transporte de elétrons nos canais L_{10} e L_{20} . A **Figura 4.4 (a)** mostra um canal semicondutor InAlAs/InGaAs com largura $L = 10 \text{ nm}$, na direção y . Os auto-estados de um poço quântico, com potencial de confinamento $V_e = 600 \text{ meV}$, é mostrado na **Figura 4.4 (b)**. Apenas três estados estão ligados ao poço de largura L_{10} : o estado fundamental $E_0 = 58.09 \text{ meV}$, o primeiro estado excitado $E_1 = 226.68 \text{ meV}$ e o segundo estado excitado $E_2 = 479.01 \text{ meV}$ para energia cinética ε_1 . As sub-bandas dos demais canais são encontradas na **Tabela 4.2** com diferentes energias cinéticas.

Canal	Fundamental (<i>meV</i>)	1° Estado (<i>meV</i>)	2° Estado (<i>meV</i>)
L_{10}	58.09	226.67	479.01
L_{15}	30.48	120.86	267.17
L_{20}	17.43	69.47	155.21
L_{30}	8.66	34.62	77.71
L_{40}	4.97	19.89	44.71
L_{50}	3.32	13.29	29.89

Tabela 4.2: Valores das sub-bandas para canais L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} para valor de ε_1 .

A **Figura 4.4 (c)** mostra os auto estados do poço em função da largura L do poço. Na **Figura 4.4 (d)** e **(e)** mostra o diagrama das bandas de energia $E(k_x)$ em função do vetor de onda k_x para L_{10} e L_{20} . As linhas traço-pontos em azul e em vermelho indicam, respectivamente, os valores médios da energias cinéticas do pacote de onda ε_1 e ε_3

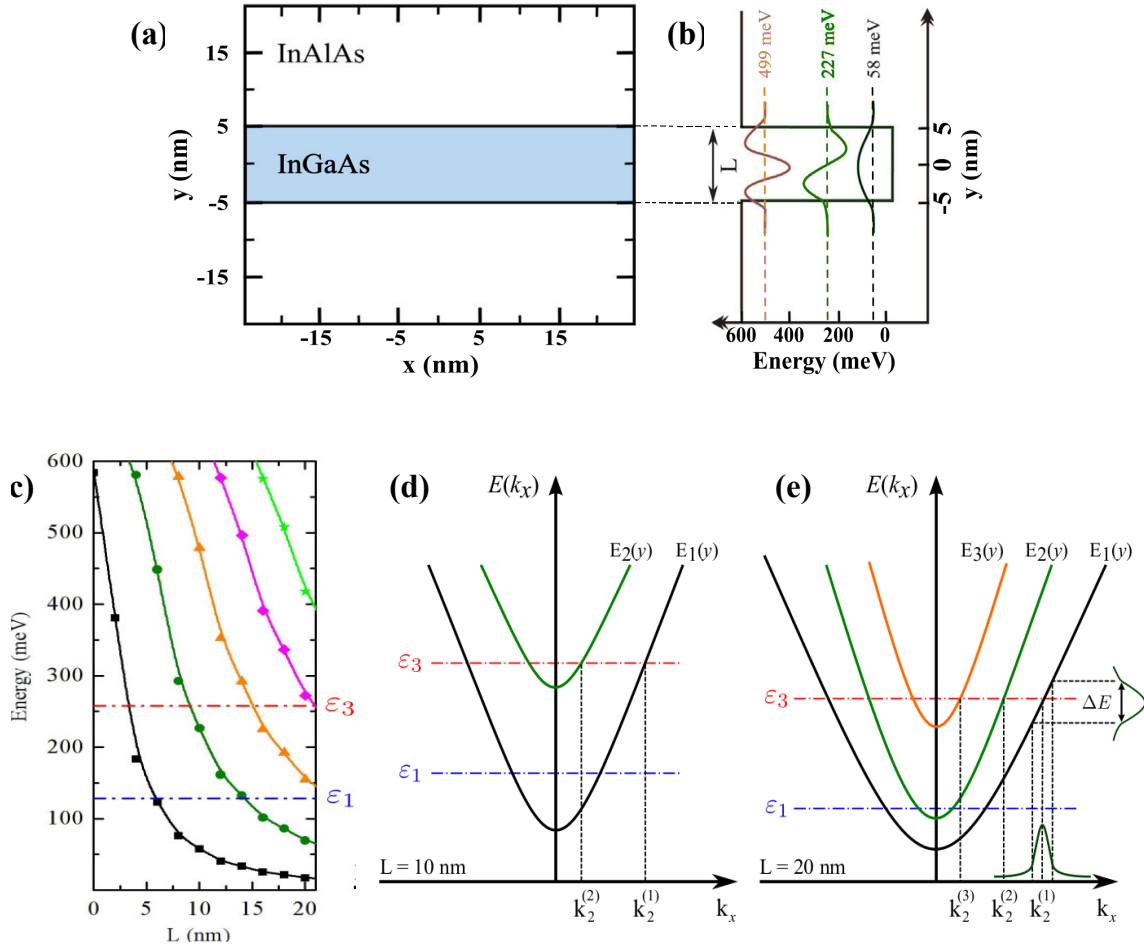


Figura 4.4: (Color online) Em (a) temos o canal semiconductor InAlAs/InGaAs com largura $L_{10} = 10 \text{ nm}$, na direção y . (b) Diagrama representa as bandas de energia para o estado fundamental, 1° e 2° estados excitados do poço quântico com largura L_{10} . (c) Diagramas esquemáticos que representam as energias da sub-banda para L_{10} . Em (d) e (e) temos os gráficos que representam as energias da sub-banda em função do vetor de onda k_x na direção x , para largura de canal L_{10} e L_{20} . Figuras modificadas da referências [26] e [15].

Com a energia cinética é possível calcular a influência da sub-banda no espalhamento do pacote de ondas. O vetor de onda k_x permitido para cada energia cinética ε , em diferentes sub-bandas, depende da largura L do poço quântico [2]. Neste trabalho, escolheu-se

a energia cinética mais alta de forma a cobrir as duas primeiras sub-bandas de energia do menor canal quântico (L_{10}), fazendo com que o mínimo da sub-banda E_2^y fosse encontrada em torno da energia cinética ε_3 [2].

A **Figura 4.5** mostra módulo quadrado da função de onda em quatro instantes distintos: 300, 600, 1.200 e 12.600 fs para os canais L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} com uma energia cinética $\varepsilon_1 = 70 meV$. O tempo $t = 300 fs$ temos o início da propagação do pacote de onda. No tempo $t = 600 fs$ temos o pacote de onda incidindo na barreira. No tempo $t = 1.200 fs$ temos a transmissão e a reflexão do pacote de onda. E por fim, temos no tempo $t = 12.600 fs$ temos o pacote se propagando nas sub-bandas dos canais.

Na **Figura 4.5 (a)**, no tempo $t = 300 fs$, vemos o início da propagação do pacote. Em $t = 600 fs$ vemos o pacote incidindo na barreira (poros). Em $t = 1.200 fs$ é observado o pacote de onda sendo refletido e pouco sendo transmitido. No tempo $t = 12.600 fs$ vemos que o espalhamento muda o vetor de onda e o pacote se propaga no 1° estado excitado.

Na **Figura 4.5 (b)**, no tempo $t = 600 fs$, vemos o pacote incidindo na barreira (poros). Em $t = 1.200 fs$ é observado que temos uma boa transmissão do pacote de onda. No tempo $t = 12.600 fs$ vemos o pacote se propaga no 1° e 2° estado excitado, observa-se isso também na **Figura 4.5 (c)**.

Nas **Figura 4.5 (d)**, **(e)** e **(f)** vemos que no tempo $t = 1.200 fs$, quase todo o pacote de onda é transmitido. **Figura 4.5 (d)** observa-se que o pacote de onda se propaga em 3 estados, enquanto que na **Figura 4.5 (e)** e **(f)** vemos o pacote se propagando em 4 estados.

A **Figura 4.6** mostra módulo quadrado da função de onda em quatro instantes distintos: 300, 600, 1.200 e 12.600 fs para os canais L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} com uma energia cinética $\varepsilon_2 = 140 meV$. Na **Figura 4.6 (a)**, no tempo $t = 1.200 fs$, vemos o pacote de onda sendo refletido e sendo transmitido. No tempo $t = 12.600 fs$ vemos o pacote se propagando no 1° e no 2° estado excitado. Vemos que na **Figura 4.6 (b)** também temos o pacote de onda se propagando no 1° e no 2° estado excitado. Na **Figura 4.6 (c)** observa-se 3 estados. Na **Figura 4.6 (d)** vemos 4 estados. Na **Figura 4.6 (e)** e **(f)** vemos 6 estados.

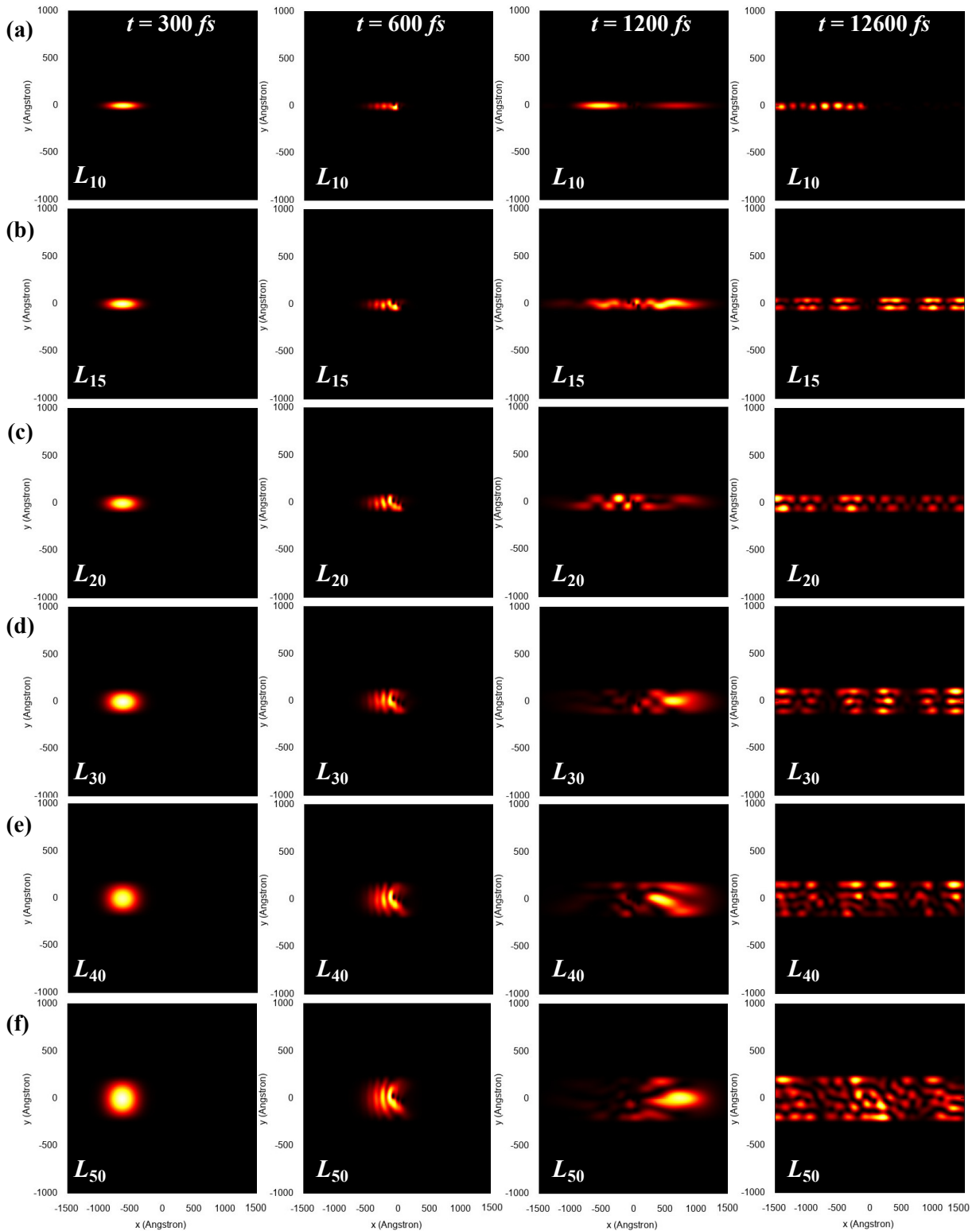


Figura 4.5: (Color online) Módulo quadrado da função de onda em quatro instantes de tempo diferentes, propagado a partir do estado fundamental com energia cinética $\varepsilon_1 = 70 \text{ meV}$. A primeira coluna mostra o instante $t = 300 \text{ fs}$, enquanto que as colunas seguintes mostram, respectivamente, os instantes $t = 600 \text{ fs}$, $t = 1.200 \text{ fs}$ e $t = 12.600 \text{ fs}$, para larguras de canais: L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} .

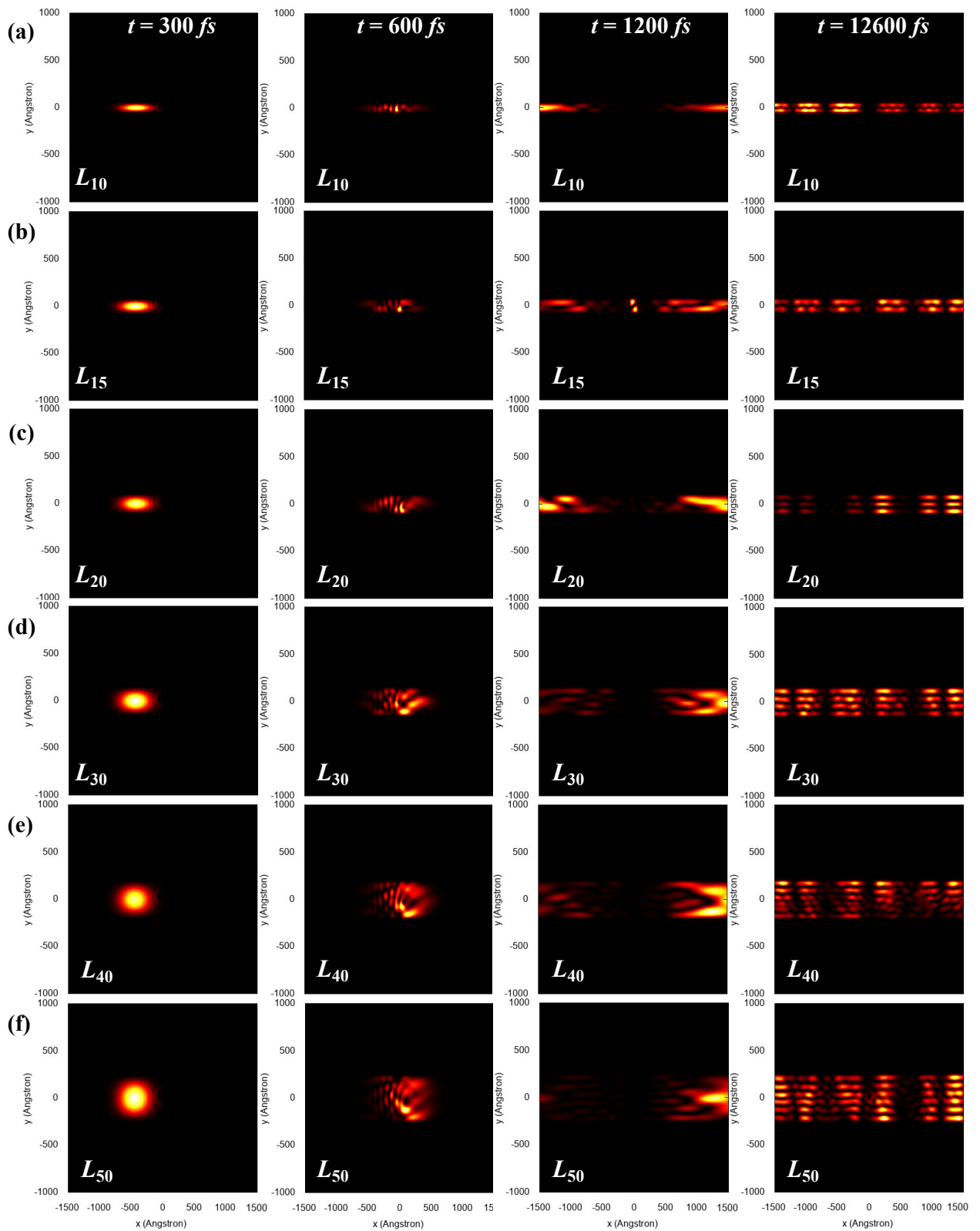


Figura 4.6: (Color online) (Color online) Módulo quadrado da função de onda em quatro instantes de tempo diferentes, propagado a partir do estado fundamental com energia cinética $\varepsilon_2 = 140$ meV. A primeira coluna mostra o instante $t = 300$ fs, enquanto que as colunas seguintes mostram, respectivamente, os instantes $t = 600$ fs, $t = 1.200$ fs e $t = 12.600$ fs, para larguras de canais: L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} .

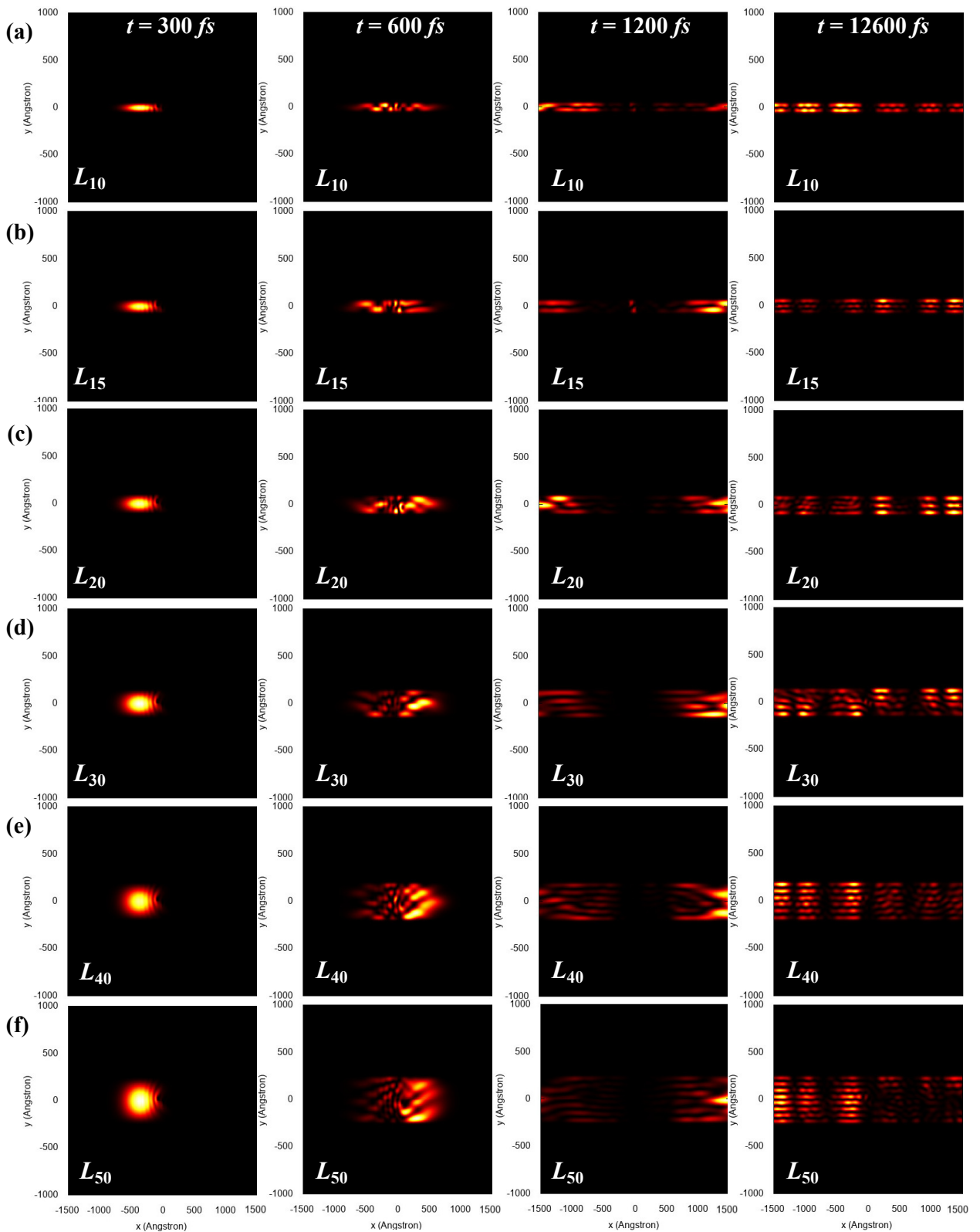


Figura 4.7: (Color online) Módulo quadrado da função de onda em quatro instantes de tempo diferentes, propagado a partir do estado fundamental com energia cinética $\varepsilon_3 = 180 \text{ meV}$. A primeira coluna mostra o instante $t = 300 \text{ fs}$, enquanto que as colunas seguintes mostram, respectivamente, os instantes $t = 600 \text{ fs}$, $t = 1.200 \text{ fs}$ e $t = 12.600 \text{ fs}$, para larguras de canais: L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} .

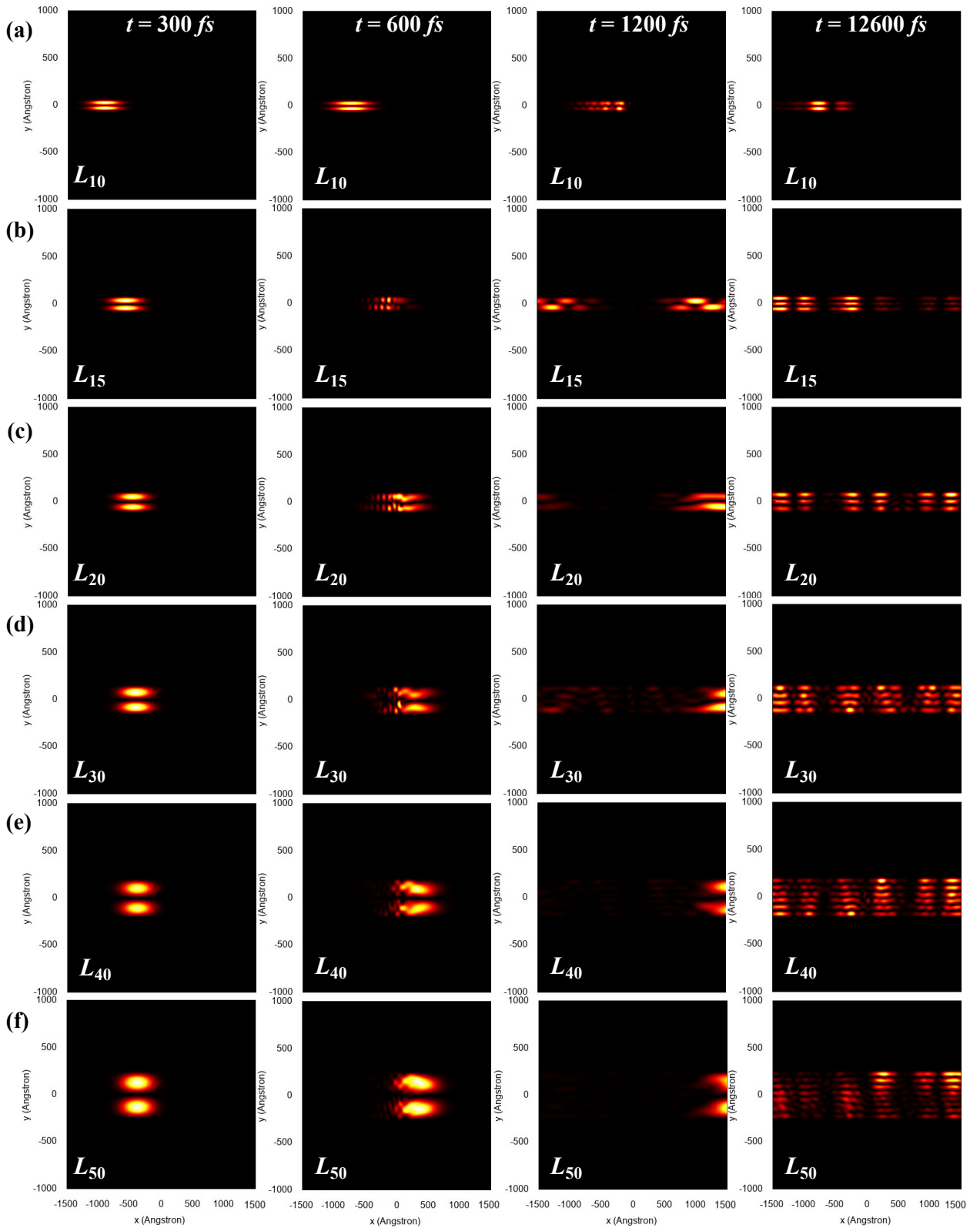


Figura 4.8: (Color online) Módulo quadrado da função de onda em quatro instantes de tempo diferentes, propagado a partir do 1º estado excitado com energia cinética $\varepsilon_0 = 180 \text{ meV}$. A primeira coluna mostra o instante $t = 300 \text{ fs}$, enquanto que as colunas seguintes mostram, respectivamente, os instantes $t = 600 \text{ fs}$, $t = 1.200 \text{ fs}$ e $t = 12.600 \text{ fs}$, para larguras de canais: L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} .

A **Figura 4.7** mostra módulo quadrado da função de onda em quatro instantes distintos: 300, 600, 1.200 e 12.600 fs para os canais L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} com uma energia cinética $\varepsilon_3 = 140 meV$. Na **Figura 4.7 (a)**, no tempo $t = 1.200 fs$, vemos o pacote de onda sendo refletido e sendo transmitido. No tempo $t = 12.600 fs$ vê-se o pacote se propagando no 1° e no 2° estado excitado. Na **Figura 4.7 (b)** observa-se 3 estados. É possível observar que na **Figura 4.7 (c)** também temos 3 estados excitados no canal. Na **Figura 4.7 (d)** tem-se 4 estados. Na **Figura 4.7 (e)** vê-se 6 estados. **Figura 4.7 (f)** observa-se 8 estados.

A **Figura 4.8** mostra módulo quadrado da função de onda propagando-se no 1° estado excitado, que pode ser visto por dois picos da função de onda. Tem-se a propagação em quatro instantes distintos: 300, 600, 1.200 e 12.600 fs para os canais L_{10} , L_{15} , L_{20} , L_{30} , L_{40} e L_{50} com uma energia cinética $\varepsilon_0 = 180 meV$. Na **Figura 4.8 (a)**, no tempo $t = 300 fs$, vê-se o início da propagação do pacote. Em $t = 1.200 fs$ é calculado o pacote de onda sendo refletido quase que por completo. No tempo $t = 12.600 fs$ tem-se que o espalhamento muda o vetor de onda e o pacote se propaga no 1° estado excitado. Na **Figura 4.8 (b)** observa-se 3 estados. Vê-se que na **Figura 4.8 (c)** também tem 3 estados excitados no canal. Na **Figura 4.8 (d)** vê-se 4 estados. Na **Figura 4.8 (e)** tem 6 estados. **Figura 4.8 (f)** observa-se 8 estados.

Por fim, estudou-se neste capítulo o espalhamento de pacotes de ondas em canais quânticos semicondutores com obstruções (poros). O método usado se dá na solução da equação de Schrödinger dependente do tempo, sendo consistente com a teoria da massa efetiva e com formalismo da função envelope. Os resultados mostraram que as obstruções no interior do canal provocam espalhamento do pacote de onda. A transmissão e a probabilidade de corrente são fortemente dependentes da energia cinética ε do pacote de onda e largura do canal. A transmissão aumenta a medida que o canal cresce. Para canal estreito, como L_{10} , o pacote de onda é refletido para ε_1 . As energias das subbandas diminuem a medida que a largura do canal aumentam. Os resultados obtidos neste trabalho podem servir de referência tanto para estudos de interesse acadêmico quanto para estudos experimentais.

O método aplicado neste trabalho ainda pode ser usada em uma vasta aplicação em estudos de sistemas semicondutores de baixa dimensionalidade, segundo "Almeida [2]", podemos ter "estudos em canais quânticos envolvendo interações do tipo: *i* - elétron-impureza; *ii* - elétron-fótons; *iii* - elétron-elétron; *iv* - efeito de campos externos, magnético e elétrico, estático ou dependente do tempo".

Conclusão e Perspectivas Futuras

Neste trabalho foi utilizado a técnica de *split-operator*, que é consistente com a teoria da massa efetiva e com formalismo da função envelope, para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, além de analisar a evolução temporal do pacote de onda do tipo Gaussiano e as propriedades eletrônicas de nanoestruturas semicondutoras, que neste trabalho foram estudadas por fios quânticos com barreiras (poros) por meio de canais.

No capítulo quatro foi investigado propriedades eletrônicas de um pacote de ondas, formado pela combinação de uma função Gaussiana com uma onda plana, que é propagado com diferentes energias cinéticas nos canais porosos de diferentes larguras. Desta forma, o pacote de onda que é refletido e transmitido através dos poros, proporciona o estudo de espalhamento de elétrons em diferentes sub-bandas de energia. Os resultados encontrados mostram que a transmissão e a probabilidade de corrente aumentam conforme a energia cinética e a largura do canal aumenta, ou seja, aumentando o valor da energia cinética temos maior de probabilidade de transmissão do pacote de onda através dos poros independente da largura do canal e conseqüentemente uma maior probabilidade de corrente no canal poroso.

Os resultados apresentados nesse trabalho, assim como a técnica utilizada (*split-operator*), podem servir como referência para trabalhos futuros em sistemas de baixa dimensionalidade. O controle do transporte de elétrons nos sistemas propostos aqui, podem ser investigados utilizando a técnica *split-operator*, em "sistemas com interação elétron-elétron em sistemas de baixa dimensionalidade, propriedades ópticas e interação elétron-fóton, além de efeito de campos externos: elétrico e magnético" [2].

A.1 Demonstrações Matemáticas

Por uma questão de completeza é mostrado neste Apêndice as principais demonstrações utilizadas neste trabalho.

A) Se quer demonstrar a seguinte relação

$$\exp \left[\varepsilon \left(\hat{A}_1 + \hat{A}_2 \right) \right] = \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] \exp \left[\varepsilon \hat{A}_2 \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^3), \quad (\text{A.1})$$

que é utilizada para f_m tomando $m = 2$, ou seja, $f_2(\hat{A}_1, \hat{A}_2)$.

Demonstração:

Temos da relação de [20] que

$$\exp \left[\varepsilon \sum_{j=1}^q \hat{A}_j \right] = f_m \left(\hat{A}_1, \hat{A}_2, \dots, \hat{A}_q \right) + \mathcal{O} \left(\varepsilon^{m+1} \right), \quad (\text{A.2})$$

para $m = 2$ e $j = 2$, que são as restrições escolhidas para se ter em todas as aproximações um erro na ordem de (Δt^3) e ser utilizada na **Equação (2.24)**, temos

$$\exp \left[\varepsilon \left(\hat{A}_1 + \hat{A}_2 \right) \right] = f_2 \left(\hat{A}_1, \hat{A}_2 \right) + \mathcal{O} \left(\varepsilon^3 \right) = \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] \exp \left[\varepsilon \hat{A}_2 \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^3). \quad (\text{A.3})$$

Por definição, a exponencial de um operador \hat{A}_1 é [30]

$$\exp[\hat{A}_1] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\hat{A}_1^n}{n!}. \quad (\text{A.4})$$

Assim,

$$\begin{aligned} \exp\left[\varepsilon(\hat{A}_1 + \hat{A}_2)\right] &= 1 + \varepsilon(\hat{A}_1 + \hat{A}_2) + \frac{\varepsilon^2}{2!}(\hat{A}_1 + \hat{A}_2)^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\ &= 1 + \varepsilon\hat{A}_1 + \varepsilon\hat{A}_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_1\hat{A}_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_2\hat{A}_1 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_1^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_2^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3). \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Por outro lado,

$$\begin{aligned} \exp\left[\frac{\varepsilon}{2}\hat{A}_1\right] \exp\left[\varepsilon\hat{A}_2\right] \exp\left[\frac{\varepsilon}{2}\hat{A}_1\right] &= \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\hat{A}_1 + \frac{\varepsilon^2}{8}\hat{A}_1^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3)\right) \cdot \left(1 + \varepsilon\hat{A}_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_2^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3)\right) \\ &\quad \cdot \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\hat{A}_1 + \frac{\varepsilon^2}{8}\hat{A}_1^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3)\right) \\ &= \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\hat{A}_1 + \frac{\varepsilon^2}{8}\hat{A}_1^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3)\right) \cdot \\ &\quad \cdot \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}\hat{A}_1 + \frac{\varepsilon^2}{8}\hat{A}_1^2 + \varepsilon\hat{A}_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_2\hat{A}_1 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_2^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3)\right) \\ &= 1 + \varepsilon\hat{A}_1 + \varepsilon\hat{A}_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_1\hat{A}_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_2\hat{A}_1 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_1^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}\hat{A}_2^2 + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

Comparando as Equação (A.6) e Equação (A.5), conclui-se que

$$\exp \left[\varepsilon \left(\hat{A}_1 + \hat{A}_2 \right) \right] = \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] \exp \left[\varepsilon \hat{A}_2 \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \quad (\text{A.7})$$

■

B) Se quer demonstrar a seguinte relação

$$\exp \left[\varepsilon \left(\hat{A}_1 + \hat{A}_2 + \hat{A}_3 \right) \right] = \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_3 \right] \exp \left[\varepsilon \hat{A}_2 \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_3 \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^3). \quad (\text{A.8})$$

Demonstração:

Utilizando a **Equação (A.1)**, pode-se escrever

$$\begin{aligned} \exp \left[\varepsilon \left(\hat{A}_1 + \hat{A}_2 + \hat{A}_3 \right) \right] &= \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] \exp \left[\varepsilon \left(\hat{A}_1 + \hat{A}_3 \right) \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\ &= \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] \left\{ \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_3 \right] \exp \left[\varepsilon \hat{A}_2 \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_3 \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \right\} \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \\ &= \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_3 \right] + \exp \left[\varepsilon \hat{A}_2 \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_3 \right] \exp \left[\frac{\varepsilon}{2} \hat{A}_1 \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^3) \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

■

C) Se quer demonstrar a seguinte relação

$$\exp \left[\varepsilon \hat{A} \right] = \left[1 - \frac{\varepsilon \hat{A}}{2} \right]^{-1} \left[1 + \frac{\varepsilon \hat{A}}{2} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^4). \quad (\text{A.10})$$

Demonstração:

$$\exp[\varepsilon\hat{A}] = 1 \exp[\varepsilon\hat{A}] = \left\{ \exp\left[-\frac{\varepsilon\hat{A}}{2}\right] \right\}^{-1} \left\{ \exp\left[-\frac{\varepsilon\hat{A}}{2}\right] \right\} \exp[\varepsilon\hat{A}]. \quad (\text{A.11})$$

Assim,

$$\exp[\varepsilon\hat{A}] = \left\{ \exp\left[-\frac{\varepsilon\hat{A}}{2}\right] \right\}^{-1} \exp\left[\frac{\varepsilon\hat{A}}{2}\right]. \quad (\text{A.12})$$

Utilizando a **Equação (A.2)**, pode-se escrever

$$\exp[\varepsilon\hat{A}] = \left[1 - \frac{\varepsilon\hat{A}}{2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right]^{-1} \left[1 + \frac{\varepsilon\hat{A}}{2} + \mathcal{O}(\varepsilon^2) \right]. \quad (\text{A.13})$$

Então,

$$\exp[\varepsilon\hat{A}] = \left[1 - \frac{\varepsilon\hat{A}}{2} \right]^{-1} \left[1 + \frac{\varepsilon\hat{A}}{2} \right] + \mathcal{O}(\varepsilon^4). \quad (\text{A.14})$$

■

D) Se quer demonstrar a seguinte relação

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2) \quad (\text{A.15})$$

e

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2). \quad (\text{A.16})$$

Demostração:

A série de Taylor de uma função $f(x)$ pode ser definida

$$f(x+\Delta x) = f(x) + \frac{df(x)}{dx}\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{d^2f(x)}{dx^2}\Delta x^2 + \frac{1}{3!}\frac{d^3f(x)}{dx^3}\Delta x^3 + \dots + \frac{1}{n!}\frac{d^n f(x)}{dx^n}\Delta x^n \quad (\text{A.17})$$

ou ainda, trocando Δx por $-\Delta x$

$$f(x - \Delta x) = f(x) - \frac{df(x)}{dx}\Delta x + \frac{1}{2!}\frac{d^2f(x)}{dx^2}\Delta x^2 - \frac{1}{3!}\frac{d^3f(x)}{dx^3}\Delta x^3 - \dots + \frac{(-1)^n}{n!}\frac{d^n f(x)}{dx^n}\Delta x^n \quad (\text{A.18})$$

Subtraindo a **Equação (A.18)** da **Equação (A.17)** obtemos

$$f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x) = +2\frac{df(x)}{dx}\Delta x + 2\frac{1}{3!}\frac{d^3f(x)}{dx^3}\Delta x^3 + \dots \quad (\text{A.19})$$

Multiplicando ambos os lados da **Equação (A.19)** por $\frac{1}{2\Delta x}$ e deixando em evidência $\frac{df(x)}{dx}$, temos

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + \left(-\frac{1}{3!}\frac{d^3f(x)}{dx^3}\Delta x^2 - \frac{1}{5!}\frac{d^5f(x)}{dx^5}\Delta x^4 - \dots \right). \quad (\text{A.20})$$

Assim,

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (\text{A.21})$$

onde

$$\mathcal{O}(\Delta x^2) = -\frac{1}{3!} \frac{d^3 f(x)}{dx^3} \Delta x^2 - \frac{1}{5!} \frac{d^5 f(x)}{dx^5} \Delta x^4 - \dots \quad \mathbf{c.q.d.} \quad (\text{A.22})$$

Agora se as **Equação (A.17)** e **Equação (A.18)**, obtém-se

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + \left(-\frac{2}{4!} \frac{d^4 f(x)}{dx^4} \Delta x^2 - \frac{2}{6!} \frac{d^6 f(x)}{dx^6} \Delta x^4 - \dots \right). \quad (\text{A.23})$$

Logo temos então

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (\text{A.24})$$

onde

$$\mathcal{O}(\Delta x^2) = -\frac{2}{4!} \frac{d^4 f(x)}{dx^4} \Delta x^2 - \frac{2}{6!} \frac{d^6 f(x)}{dx^6} \Delta x^4 - \dots \quad \mathbf{c.q.d.} \quad (\text{A.25})$$

Referências Bibliográficas

- [1] Kaschny, J. R., **Os 60 Anos do Transistor**. *Physika*. Disponível em: <<https://physika.info/site/index.php/variedades/comentarios/11-os-60-anos-do-transistor>>. Acessado em 23 em março de 2021;
- [2] Almeida, A. R., **Transporte de pacote de ondas em fios quânticos não ramificados e ramificados**. *Dissertação* (Mestrado em Física), Universidade Federal do Mato Grosso, Cuiabá, (2016);
- [3] Moore, G. E., **Cramming more components onto integrated circuits**. *Electronics*, vol. 38, n. 8, (1965);
- [4] Meyer, M., **A história do Vale do Silício**. *Oficina da net*, 2017. Disponível em: <<https://www.oficinadanet.com.br/post/18651-a-historia-do-vale-do-silicio>>. Acessado em 23 em março de 2021;
- [5] Wilk, G. D.; Wallace, R. M.; Anthony, J. M., **High-k gate dielectrics: Current status and materials properties considerations**, *Journal of Applied Physics*, 89, 5243, (2001);
- [6] Ashcroft, N. W.; Mermin, N. D., **Solid State Physics**. [S.l.]: *Publishing Thomson Learning*, (1976);
- [7] Chaves, A., **Confinamento em fios quânticos semicondutores**. *Dissertação* (Mestrado em Física), Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, (2007);

- [8] Sousa, A. A., **Fios quânticos Core-Shell com efeito de potencial de carga imagem**. *Dissertação* (Mestrado em Física), Universidade Federal do Mato Grosso, Cuiabá, (2012);
- [9] Cardona, M.; Yu, Y. P., **Fundamentals of Semiconductor - Physics and materials properties**, Editor: Springer, (2001);
- [10] Nussenzveig, H. M., **Curso de Física básica, 4: Ótica, relatividade, física quântica**, 2ª edição, Editora: Blucher, São Paulo, (2014);
- [11] Nayan, R., **What's the energy spectrum of the Kronig-Penny model?**. *Quora*, 2019. Disponível em: <<https://www.quora.com/Whats-the-energy-spectrum-of-the-Kronig-Penny-model>>. Acessado em 25 em março de 2021;
- [12] Massa, L. O., **Estrutura eletrônica da banda de valência de uma molécula de pontos quânticos verticais**, *Monografia* (Trabalho de Conclusão de Curso), Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, (2009);
- [13] Harrison, S., **Exploring and Exploiting Charge-Carrier Confinement in Semiconductor Nanostructures: Heterodimensionality in Sub-Monolayer InAs in GaAs and Photoelectrolysis Using Type-II - Heterojunctions**, *Dissertação* (Mestrado em Física), Lancaster University, (2016);
- [14] Hudait, M. K.; Clavel, M.; Goley, P.; Jain, N.; Zhu, Y., **Heterogeneous Integration of Epitaxial Ge on Si using AlAs/GaAs Buffer Architecture: Suitability for Low-power Fin Field-Effect Transistors**, *Scientific Reports* 4, Article number: 6964, (2014).
- [15] Sousa, A. A., **Vazamentos de correntes e ineficiência de corrente de transporte em nanoestruturas semicondutoras investigadas através de propagação de pacotes de onda**. *Tese* (Doutorado em Física), Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, (2015);
- [16] Feit, M. D.; Flec, J. A., **Of the schrödinger equation by a spectral method**. *Journal of Computational Physics*, n. 47, p. 412–433, Feb (1982);

- [17] Degani, M. H., **Stark ladders in strongly coupled gaas-alas superlattices.** *Appl. Phys*, n. 59, p. 57–59, Apr (1991);
- [18] Pereira, J. M.; Peeters, F. M.; Chaves, A.; Farias, G. A., **Tunelamento de klein em barreiras simples e múltiplas em grafeno.** *Semiconductor Science and Technology*, n. 3, p. 25, Fev, (2010);
- [19] Sakurai, J. J., **Modern Quantum Mechanics.** [S.l.]: *Addison Wesley Logman*, (1994);
- [20] Suzuki, M., **Fractal decomposition of exponential operators with applications to manybody theories and monte carlo simulations.** *Physics Letters A*, p. 319–323, (1990);
- [21] Braga, J. P. M., **Técnica split operator em coordenadas generalizadas.** *Dissertação* (Mestrado em Física), Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, (2010).
- [22] DeVries, P. L., A, **First course in computational physics.** *John Wiley e Sons*, New York (1994);
- [23] Strauss, W. A., **Partial differential equations.** *John Wiley e Sons*, New York, (1992);
- [24] Sousa; J. S.; Freire, V. N., **Electronic and optical properties of C_aCO_3 porous nanoparticles.** *Journal of Applied Physics*, p. 100, (2006);
- [25] Mamun, A. A. M.; Noor, M.; Hasanuzzaman, M; Hashmi, M. S., **Nano-Porous Materials for Use in Solar Cells and Fuel Cells.** *Elsevier*, p. 549-560, (2020);
- [26] Almeida, A. R.; Pereira, T. A. S.; Sousa, A.A., **Dynamics of wave packet transport in branched nanowires.** Volume 123, (2020);
- [27] Manolopoulos, D. E., **Derivation and reflection properties of a transmission-free absorbing potential.** *Journal of Chemical Physics*, n. 117, p. 9552, (2002);

-
- [28] Gradshteyn, I. S.; Ryzhik, I. M., **Table of integrals, series, and products.**, [S.l.]: (*Academic, San Diego*), (7th ed.), (2007);
- [29] Chaves, A.; Farias, G. A.; Peeters, F. M.; Szafran, B., **Derivation and reflection properties of a transmission-free absorbing potential.** *Physical Review B*, n.80, (2009);
- [30] Cohen-Tannoudji, C.; Diu, B.; Laloë, F., **Quantum Mechanics**, *Hermann e John Wiley e Sons*, Vol. 1, Paris, (1977);