



UFC

**UNIVERSIDADE FEDERAL DO CEARÁ
CENTRO DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA**

RAVENNA RODRIGUES OLIVEIRA

**FOTODETECTOR DE PONTO QUÂNTICO SEMICONDUTOR OPERANDO EM
FREQUÊNCIA TERAHERTZ**

**Fortaleza
2021**

RAVENNA RODRIGUES OLIVEIRA

FOTODETECTOR DE PONTO QUÂNTICO SEMICONDUTOR OPERANDO EM
FREQUÊNCIA TERAHERTZ

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Orientador: Dr. Andrey Chaves.

FORTALEZA
2021

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação
Universidade Federal do Ceará
Biblioteca Universitária
Gerada automaticamente pelo módulo Catalog, mediante os dados fornecidos pelo(a) autor(a)

- O51f Oliveira, Ravenna Rodrigues.
Fotodetector de ponto quântico semicondutor operando em frequência Terahertz / Ravenna Rodrigues
Oliveira. – 2021.
57 f. : il. color.
- Tese (doutorado) – Universidade Federal do Ceará, Centro de Ciências, Programa de Pós-Graduação em Física, Fortaleza, 2021.
Orientação: Prof. Dr. Andrey Chaves.
1. dispositivos Terahertz. 2. ponto quântico. 3. fotodetector. 4. poço quântico. 5. split-operator. I. Título.
CDD 530
-

RAVENNA RODRIGUES OLIVEIRA

FOTODETECTOR DE PONTO QUÂNTICO SEMICONDUTOR OPERANDO EM
FREQUÊNCIA TERAHERTZ

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física da Universidade Federal do Ceará, como requisito parcial para a obtenção do Título de Doutor em Física. Área de Concentração: Física da Matéria Condensada.

Aprovada em 20/07/2021.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Andrey Chaves (Orientador)
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Diego Rabelo da Costa
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. João Milton Pereira Jr.
Universidade Federal do Ceará

Prof. Dr. Robson Ferreira
Université PSL

Prof. Dr. Teldo Anderson da Silva Pereira
Universidade Federal de Mato Grosso

A minha avó Ilda,

e

aos TDAHs

AGRADECIMENTOS

Agradeço a minha família pelo apoio financeiro e psicológico que me sempre dedicaram: Antonia Lusanira Rodrigues Oliveira e José Glairton Oliveira, meus pais, Romany Rodrigues Oliveira, a Fabíola Oliveira, a Fabiana Oliveira, a Tereza Nonato do Nascimento a Gilson Aguiar Albuquerque e Maria Aila Albuquerque. Agradeço aos meus amigos do grupo GTMC pelo apoio em inúmeros momentos, em especial a Daniel Queiroz, Duarte José Pereira de Sousa, Gabriel Oliveira, Ícaro Rodrigues Lavor, Igor Lima, Johnathas D'arf Severo Forte, Lucas Cavalcante e Luan Vieira de Castro.

Agradeço ao professor Andrey Chaves por todo o apoio que me foi dado e a todos os meus colegas e amigos. Agradeço também ao CNPq que sem o apoio financeiro este trabalho não seria possível. O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

RESUMO

Fotodetectores são dispositivos detectores de luz geralmente formados por materiais semicondutores. Eles são estudados desde o século XX, e costumam ser baseados em poços e pontos quânticos, por exemplo. As aplicações para fotodetectores variam desde comunicações em optoeletrônica, obtenção de imagens biomédicas, nas indústrias militares, obtenção de imagens no espectro infravermelho, proteção ambiental e na indústria manufatureira. Dentre os fotodetectores, aqueles que operam em frequências da ordem de poucos Terahertz são pouco explorados atualmente, devido a uma escassez de possíveis dispositivos que trabalhem nesse intervalo de frequências. Neste trabalho, propomos um dispositivo fotodetector de ponto quântico que opera em Terahertz. Para isso, a fotocorrente gerada devido a transições entre autoestados mediados por luz em um ponto quântico semicondutor planar anexado a canais é investigada teoricamente. Um elétron é confinado no ponto por um efeito puramente quântico, que é devido à alta energia do estado fundamental dos poços formados pelos canais, quando comparada à do ponto. A dinâmica de tal elétron confinado interagindo com um pulso de luz é investigada resolvendo-se a equação de Schrödinger dependente do tempo com a aproximação de massa efetiva. O método numérico usado neste estudo vai além da menor ordem de aproximação na teoria de perturbação. Nossos resultados mostram a coexistência entre contribuição linear e não linear para a fotocorrente gerada no sistema. Todos os picos de fotocorrente evidentes são observados com fótons no intervalo de frequências Terahertz, quando os elétrons excitados são posteriormente transmitidos do ponto quântico para canais laterais do sistema. Os picos podem se tornar mais evidentes com o aparecimento de constrições ao conectar o ponto aos canais. Detalhes da dependência da frequência, intensidade e nitidez do pico para os parâmetros do sistema são discutidos.

Palavras-chave: dispositivos Terahertz; fotodetector; ponto quântico; poço quântico; split-operator.

ABSTRACT

Photodetectors are light detecting devices usually formed by semiconductors. They have been studied since the 20th century, and are normally based on quantum wells and dots, for example. Applications for photodetectors range from communications in optoelectronics, obtaining biomedical images, in military purposes, obtaining images in the infrared spectrum, to environmental protection and the manufacturing industry. Within the family of known photodetectors, those operating at frequencies in the order of a few Terahertz are significantly less explored nowadays, due to a lack of possible devices that work in that frequency range. In this work, we propose a photodetector device based on quantum dots that operates in Terahertz. In order to do so, the photo-generated current due to electronic transitions in a semiconductor planar quantum dot attached to outgoing leads is theoretically investigated. An electron is confined in the dot by a pure quantum mechanical effect, which is due to the higher ground state energy of the quantum wells forming the leads, as compared to the one in the dot. The dynamics of a such confined electron interacting with a light pulse is investigated by numerically solving time-dependent Schrödinger equation within the effective mass approximation, and goes beyond the lowest order perturbative approach. Our results shows the coexistence of both linear and non-linear contributions to the photo-generated current in this system, sharply peaked at frequencies in the terahertz range, which are further tunable by the quantum dot radius. The peaks can be made even sharper as one adds a narrow constriction in the dot-leads connection. Details of the dependence of the peaks' frequency, intensity and sharpness on the system parameters are discussed.

Keywords: Terahertz devices; photodetectors; quantum dot; quantum well; split-operator.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 – Espectro eletromagnético. Figura retirada de Ref. [4].	11
Figura 2 – Representação da banda de valência (BV) e banda de condução (BC) para um elétron: (a) na banda de valência; (b) o elétron é excitado para banda de condução por uma energia maior do que o gap , E_g , deixando um buraco na banda de valência.	13
Figura 3 – Representação de um semiconductor de gap : (a) direto, quando o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução ocorrem no mesmo ponto da rede recíproca; (b) indireto, quando os pontos ocorrem em locais diferentes da rede recíproca.	13
Figura 4 – Heterojunção de dois semicondutores distintos (azul e vermelho) que possuem $gaps$ de energia $E_{g,1}$ e $E_{g,2}$. A diferença entre as duas bandas de condução é dada por V_e e entre as duas de valência é V_h	14
Figura 5 – Representação de três pontos quânticos auto crescidos: (a) circular, (b) quadrado e (c) triangular. Figura retirada de Ref. [19].	17
Figura 6 – Diferentes métodos de crescimento epitaxial, método de Frank-van der Merwe, Stranski-Krastanov e crescimento do tipo Volmer-Weber. Figura modificada de Ref. [17].	18
Figura 7 – Representação QCL onde ocorre a emissão de fótons devido à transição de um portador de carga para um estado de energia menor em um poço, e, então, o tunelamento para o poço seguinte, cuja energia é menor, o processo é repetido. Figura modificada de Ref. [26].	20
Figura 8 – TEM para fios T separados por uma barreira de potencial de 42 nm. A espessura dos braços e do tronco do fio T são 6 nm e 14 nm, respectivamente. Figura retirada de Ref. [35].	22
Figura 9 – Parte de um fio quântico no formato V com substrato de GaAs e formado por: (a) AlAs; (b) $Al_{0,45}Ga_{0,55}As$. Figura retirada de Ref. [32].	22
Figura 10 – Esquematisação da fabricação de um fio formado de InGaAs/InP. Figura retirada de Ref. [31].	23
Figura 11 – Densidade de probabilidade do estado fundamental para fios v -groove de diferentes formatos: (a) planar (sem curvatura); (b) com curvatura abrupta; (c) estado fundamental para uma curvatura suave; (d) primeiro estado excitado para o mesmo caso de (c). Figura retirada de Ref. [36].	23

Figura 12 – Representação do funcionamento de um fotodetector. (a) Fotodetector onde o portador é excitado e atinge um estado do espectro contínuo de energias, gerando assim uma fotocorrente. (b) Fotodetector onde o portador é excitado para um estado onde ocorre tunelamento para fora da região de confinamento, gerando assim uma fotocorrente. Figura modificada de Ref. [3].	35
Figura 13 – (a) Configuração dos potenciais para o QWIP onde o poço quântico é inserido entre barreiras de potencial (azul) e o potencial para o poço sem as barreiras (cinza); (b) Coeficientes de transmissão para a configuração descrita em (a). Figura modificada da Ref. [29].	36
Figura 14 – (a) Representação do ponto quântico onde a parte cinza representa o material no qual ele é feito. (b) Energia potencial do sistema e esquema das energias do estado fundamental dos poços de largura d_1 e de largura d_2 , representados por E_0^1 e E_0^2 respectivamente, do estado fundamental do ponto E_0^D e do primeiro e segundo estado excitado, E_1^D e E_2^D respectivamente.	37
Figura 15 – Probabilidade de transmissão em função da energia da luz para o raio do ponto $R = 110 \text{ \AA}$, constrição de largura maior $d_2 = 100 \text{ \AA}$ e três constrições menores diferentes: $d_1 = 45 \text{ \AA}$ (linha preta), $d_1 = 75 \text{ \AA}$ (tracejado vermelho) e $d_1 = 100 \text{ \AA}$ (pontilhado azul). A linha pontilhada vertical verde representa a energia para o primeiro E_1^D e segundo E_2^D estados excitados do ponto, respectivamente.	39
Figura 16 – Fotocorrente calculada nos canais em função da energia da luz, $\hbar\omega$, para $E_{dyn} = 5\text{kV/cm}$ para diferentes larguras de canal mais estreito: (a) $d_1 = 100 \text{ \AA}$; (b) $d_1 = 75 \text{ \AA}$; (c) $d_1 = 45 \text{ \AA}$ (nesse caso sem constrição, $d_1 = d_2$). Cada linha representa um raio do ponto diferente: $R = 110 \text{ \AA}$, $R = 115 \text{ \AA}$, $R = 120 \text{ \AA}$, $R = 125 \text{ \AA}$ e $R = 130 \text{ \AA}$, onde a menor fotocorrente no gráfico (preto) corresponde ao $R = 110 \text{ \AA}$, a maior (laranja) representa $R = 130 \text{ \AA}$ e os valores entre correspondem aos demais raios, aumentando seu valor de 5 \AA em 5 \AA . A fotocorrente foi adicionada de 0.1 entre uma e outra curva para melhor visualização.	41
Figura 17 – Energia dos picos visto na Fig. 16 em função do raio do ponto R para $E_{dyn} = 5\text{kV/cm}$. Os símbolos cheios (vazios) representam $d_1 = 45(75) \text{ \AA}$. As linhas são o resultado teórico para a diferença de energia entre o estado fundamental do ponto e estados excitados. A linha preta de menor energia é condizente com uma transição de primeira ordem de E_0 para $E_{1,Y}^{(D)}$, cuja energia é $E_0 - E_1^{(D)}$. A linha vermelha, de maior energia, se assemelha com uma transição de segunda ordem entre E_0 e $E_3^{(D)}$, cuja energia é $(E_0 - E_3^{(D)})/2$	43

- Figura 18 – Corrente máxima em função do campo dinâmico da luz, E_{dyn} , para $R = 125$ Å e duas larguras menores do canal estreito: $d_1 = 45$ Å (pontos pretos) e 75 Å (triângulos vermelhos). Símbolos cheios (vazios) representam o pico de menor (maior) energia na Fig. 16, primeiro pico (segundo pico), que concorda com uma função de ordem quadrática (a quarta potência), como pode ser visto pelas linhas contínuas (tracejadas). 44
- Figura 19 – Evolução no tempo das projeções da função de onda propagada sobre os estados do ponto quântico isolado ($|1S\rangle, |1P_Y\rangle, |1D_Y\rangle$ e $|2S\rangle$), para o raio $R = 125$ Å, $d_1 = 45$ Å, um campo elétrico da luz $E_{dyn} = 5\text{kV/cm}$ e frequências: (a) $\omega = 29.25\text{meV}/\hbar$, correspondente ao pico de menor energia, primeiro pico, na Fig. 16; (b) $\omega = 37.5\text{meV}/\hbar$ pico de maior energia, segundo pico. 45
- Figura 20 – Corrente líquida máxima em função do módulo de um campo elétrico estático, E_{st} para os picos de maior (a) e menor (b) frequência na Fig. 16, com $R = 125$ Å, $d_1 = 45$ Å e duas intensidades de campo da luz diferentes, $E_{dyn} = 4\text{kV/cm}$ (quadrados) e $E_{dyn} = 2\text{kV/cm}$ (círculos). 46

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	11
1.1	Semicondutores e heterojunções	12
1.2	Modelo da massa efetiva	14
1.3	Pontos quânticos	16
1.4	Fotodetectores	18
1.5	Evolução temporal pelo método <i>split-operator</i>	20
1.6	Confinamento quântico em sistemas classicamente livres	21
1.7	QDIP de ponto circular com canais e constrições	23
1.8	Escopo da tese	24
2	METODOLOGIA: MÉTODO SPLIT OPERATOR	25
2.1	Soluções para a equação de Schrödinger	25
2.2	Split Operator em coordenadas cartesianas	26
2.3	Propagação em tempo imaginário	32
2.4	Condição de Contorno	33
3	FOTODETECTORES DE POÇO E PONTO QUÂNTICO	35
3.1	Ponto quântico envolto por barreiras de potenciais	36
4	CONCLUSÃO	47
	REFERÊNCIAS	49
	APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÕES MATEMÁTICAS	53
	APÊNDICE B – ARTIGO PUBLICADO RELACIONADO À TESE	56

1 INTRODUÇÃO

A radiação infravermelha foi primeiramente descoberta por um astrônomo chamado William Herschel [1, 2]. Herschel em 1800 mediu a temperatura das faixas de cores, com o auxílio de termômetros de mercúrio, usando a luz proveniente de uma janela e um prisma. Ele percebeu que, à medida que se aproximava do vermelho, a temperatura registrada pelo termômetro aumentava em relação aos valores nas demais cores. Quando ele realizou a medida após o vermelho visível, percebeu que a temperatura também havia aumentado nessa região em relação ao vermelho. Hoje em dia, chamamos essa região de frequências de infravermelho [3].

O infravermelho está associado ao comprimento de onda entre $0,70\mu\text{m}$ e $1000\mu\text{m}$, ou equivalentemente, entre 430 THz e 300 GHz, que corresponde à faixa depois do espectro do vermelho visível até as micro-ondas. A Fig. 1 representa um espectro da radiação eletromagnética onde podemos ver este intervalo de frequências.

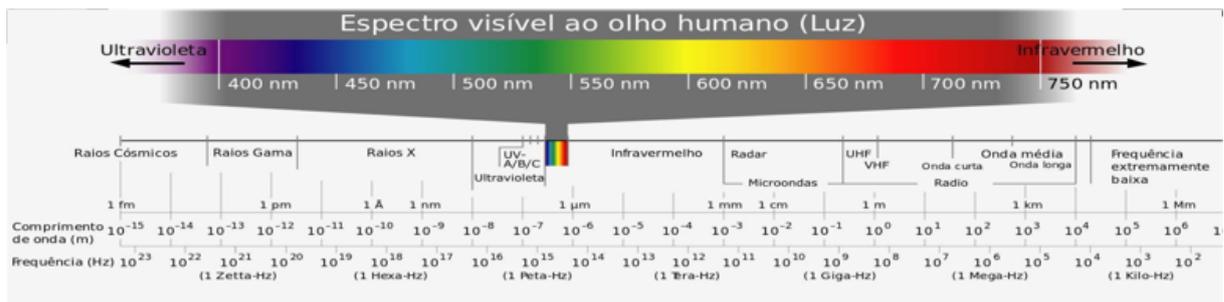


Figura 1: Espectro eletromagnético. Figura retirada de Ref. [4].

Os detectores que operam na região do infravermelho se subdividem em duas categorias: os térmicos e os fotodetectores [3, 5, 6]. Os detectores térmicos são estudados desde o século XIX e utilizam o aquecimento devido à incidência de radiação para identificar certas mudanças nas propriedades físicas dos materiais. São exemplos deles o termopar, que utiliza o efeito Seebeck para medir mudanças nas temperaturas, e o bolômetro, cujo princípio de funcionamento se baseia na radiação eletromagnética, incidente através do aquecimento de um material que tem sua resistência elétrica dependente da temperatura. Os detectores térmicos conseguem operar na temperatura ambiente e são leves, porém eles possuem uma demora na medição comparando com os fotodetectores. Já os fotodetectores, ou detectores fotônicos, são estudados desde o século XX, sendo aprimorados a partir da década de 50 [5]. Usualmente, utiliza-se materiais semicondutores para a sua fabricação [5]. Eles se baseiam na interação entre um fóton incidente e os portadores de carga do material que compõe o dispositivo: quando a diferença de energia entre o estado final e o estado inicial é igual à energia do fóton, ocorre a absorção da energia do fóton pela carga, a qual passa a contribuir para condução de corrente.

Os fotodetectores possuem uma resposta rápida, porém para que operem em Terahertz (THz), eles precisam de temperaturas bastante baixas, por causa das altas correntes de escuro e ruído, dificultando sua utilização [5, 7]. A corrente de escuro e o ruído são correntes que surgem no dispositivos mesmo sem que haja a absorção de fótons, elas podem surgir devido a presença de uma polarização externa, excitações térmicas ou devido a contatos dopados [3,5]. Outro desafio dos fotodetectores é a consolidação na tecnologia para utilização em larga escala, onde a síntese de materiais bidimensionais (2D) precisa ser extensivamente estudada e desenvolvida [7].

1.1 Semicondutores e heterojunções

Nos cristais, devido à presença do potencial periódico gerado pela distribuição espacial dos átomos da rede cristalina, surge uma estrutura de bandas onde as energias dos elétrons são restritas a essas bandas. Essas bandas são contínuas, finitas e aparecem em todos os níveis de energia do sistema [8]. Nos materiais isolantes, no estado fundamental, as bandas são completamente vazias ou preenchidas. Já nos metais, pelo menos uma das bandas está parcialmente preenchida [9]. Seja E_g a diferença entre as energias do topo da banda mais baixa e a base da banda mais alta, como mostra a Fig. 2. Usualmente, chama-se essa diferença de *gap* de energia. A banda mais baixa é denominada de banda de valência, já a mais alta, banda de condução. Entre essas duas bandas de energia, existe uma região de energias proibidas para o elétron. Em outras palavras, energia do *gap*, E_g , é a menor energia necessária para excitar o elétron da banda de valência para de condução [8]

Se um sólido possui um *gap* de energia diferente de zero à temperatura $T = 0K$, ele será um material não condutor. Porém, se aumentarmos sua temperatura, o elétron pode ser excitado termicamente passando da banda de valência para banda de condução. Assim, pode ocorrer uma condução pelo elétron termicamente excitado ou conduções do tipo buraco, que serão explicadas mais adiante, na banda de valência. A excitação de um elétron da banda de valência para a banda de condução cria excitons. Para haver condução de correntes de elétrons, ou buracos, a ligação do exciton deve ser quebrada. A condução pode ocorrer também através de elétrons provenientes de dopagem. Neste trabalho, focaremos o estudo neste ultimo caso.

O elétron que está na banda de valência pode estar bastante preso aos íons, no caso dos isolantes, ou pode estar livre para se mover na rede periódica, no caso dos metais. Os materiais semicondutores estão entre estes dois casos [10]. Eles possuem uma *gap* pequeno comparado aos isolantes, fazendo com que sejam sensíveis as impurezas ou excitações provinidas da luz. Além disso, os semicondutores possuem uma condução significativa à temperatura ambiente. A Fig. 2 representa a transição da banda de valência para de condução, deixando um "buraco" na banda de valência, que se comporta como uma partícula positiva.

Genericamente, podemos classificar os semicondutores como intrínsecos ou extrínsecos

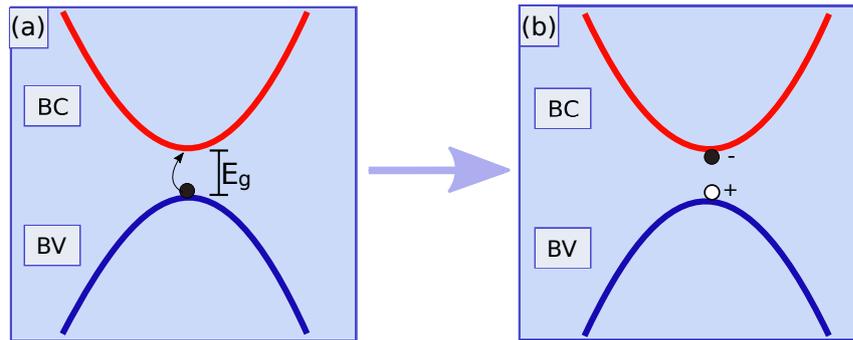


Figura 2: Representação da banda de valência (BV) e banda de condução (BC) para um elétron: (a) na banda de valência; (b) o elétron é excitado para banda de condução por uma energia maior do que o *gap*, E_g , deixando um buraco na banda de valência.

a partir de origens distintas dos elétrons na banda de condução. Se os elétrons excitados da banda de valência para banda de condução do próprio material são os que dominam as propriedades eletrônicas, dizemos que o semicondutor é intrínseco. Já no caso extrínseco, as propriedades eletrônicas são dominadas pela excitação para banda de condução dos elétrons de impurezas que o material contém. Quando a dopagem é feita por um material que provoca a "falta" de elétrons na estrutura, impurezas com predominância de receptores, é dita dopagem do tipo p. Já se ocorre a "sobra" de um elétron para a estrutura, impurezas com predominância doadoras, a dopagem é do tipo n [3]. Além disso, podemos definir o semicondutor como tendo o *gap* direto ou indireto. A Fig. 3(a) representa o *gap* direto de um semicondutor, o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução ocorrem no mesmo ponto da rede recíproca. A Fig. 3(b) representa o caso do *gap* indireto, os pontos ocorrem em locais diferentes na rede recíproca. Nesse caso, um fônon precisará participar da transição pois a transição, por si só, não conservaria momento [9].

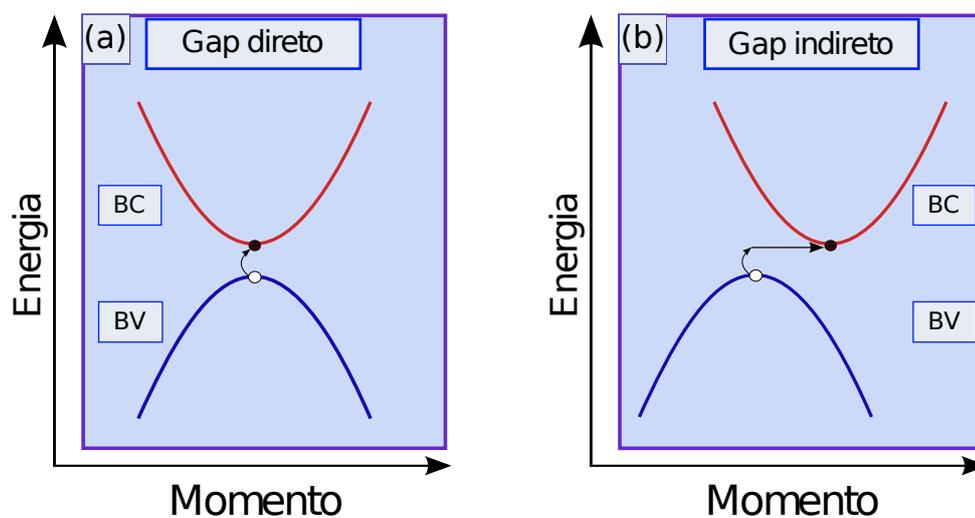


Figura 3: Representação de um semicondutor de *gap*: (a) direto, quando o máximo da banda de valência e o mínimo da banda de condução ocorrem no mesmo ponto da rede recíproca; (b) indireto, quando os pontos ocorrem em locais diferentes da rede recíproca.

Através de um processo chamado de epitaxia de feixe molecular, do inglês *molecular beam epitaxy* (MBE), ou a partir de deposição de vapor químico, do inglês *chemical vapor deposition* (CVD), por exemplo, dois ou mais materiais semicondutores podem ser juntados, formando o que chamamos de heterojunções e heteroestruturas [5, 8]. Essas estruturas possuem diferenças entre as bandas de condução e de valência ao longo da interface entre os materiais, pois os diferentes materiais dos quais são feitos possuem seus próprios valores de energia para cada banda. Essas diferenças causam degraus nos potenciais dos buracos e elétrons. A partir desses degraus de potenciais oriundos da heteroestrutura podemos, então, confinar ou limitar os elétrons e buracos, estando sujeitos a poços ou barreiras de potenciais. A Fig. 4 representa uma heterojunção, onde V_e é a diferença entre as bandas de condução e V_h a diferença entre as bandas de valência.

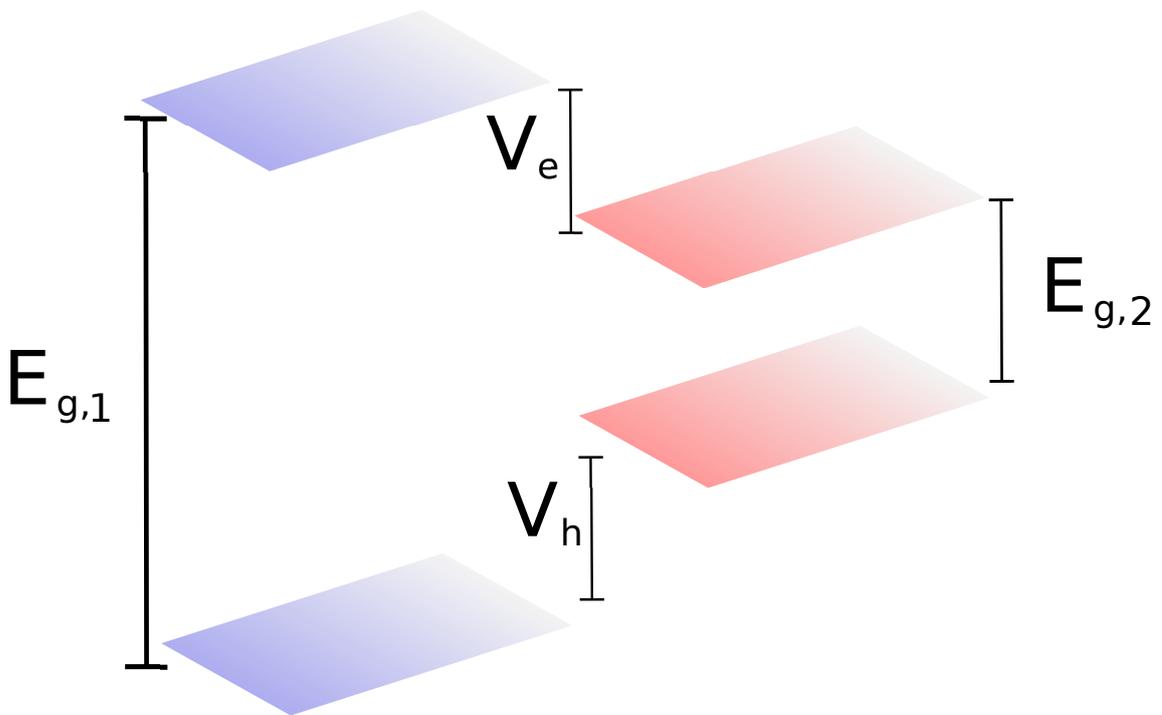


Figura 4: Heterojunção de dois semicondutores distintos (azul e vermelho) que possuem *gaps* de energia $E_{g,1}$ e $E_{g,2}$. A diferença entre as duas bandas de condução é dada por V_e e entre as duas de valência é V_h .

1.2 Modelo da massa efetiva

Seja $u(\vec{r})$ uma função que possui a mesma periodicidade da rede cristalina de um dado sólido. Os autoestados do Hamiltoniano de um elétron nesse sólido, a partir do teorema de Bloch, podem ser escritos na forma

$$\psi(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (1.1)$$

A equação de Schrödinger para um potencial periódico é dada por

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right) \psi(\vec{r}) = E(\vec{r})\psi(\vec{r}). \quad (1.2)$$

Substituindo a Eq. (1.1) na Eq. (1.2), temos que:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\vec{r}) \right) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_k(\vec{r}) = E(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_k(\vec{r}), \quad (1.3)$$

que pode ser escrita como:

$$\left[\frac{1}{2m}(\vec{p} + \hbar\vec{k})^2 + V(\vec{r}) \right] u_k(\vec{r}) = E(\vec{r})u_k(\vec{r}) \quad (1.4)$$

$$(H_0 + H_1 + H_2)u(\vec{r}) = E(\vec{r})u_k(\vec{r}), \quad (1.5)$$

onde H_0 é o Hamiltoniano do sistema não perturbado para $k = 0$, H_1 e H_2 podem ser considerados perturbações e são dados por

$$H_0 = \frac{1}{2m}\vec{p}^2 + V(\vec{r}), \quad (1.6)$$

$$H_1 = \frac{\hbar}{m}\vec{p}\cdot\vec{k}, \quad (1.7)$$

$$H_2 = \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2. \quad (1.8)$$

Seja $u_0^n(\vec{r})$ o autoestado de H_0 com autoenergias $E^n(0)$, $E_n(k)$ pode ser escrito de acordo com a teoria de perturbação até segunda ordem como

$$E^n(k) = E^n(0) + \langle u_0^n | H_1 + H_2 | u_0^n \rangle + \sum_{l \neq n} \frac{|\langle u_0^l | (H_1 + H_2) | u_0^n \rangle|^2}{E^n(0) - E^l(0)}, \quad (1.9)$$

onde o somatório é feito em todas as bandas exceto na n -ésima. Substituindo H_1 e H_2 dados nas Eqs. (1.7) e (1.8) na Eq. (1.9),

$$E^n(k) = E^n(0) + \left\langle u_0^n \left| \frac{\hbar}{m}\vec{p}\cdot\vec{k} + \frac{\hbar^2}{2m}\vec{k}^2 \right| u_0^n \right\rangle + \sum_{l \neq n} \frac{|\langle u_0^l | (\hbar/m)\vec{p}\cdot\vec{k} + (\hbar^2/2m)\vec{k}^2 | u_0^n \rangle|^2}{E^n(0) - E^l(0)}, \quad (1.10)$$

$$= E^n(0) + \frac{\hbar}{2m}\vec{k}^2 + \frac{\hbar^2}{m^2} \sum_{l \neq n} \frac{|\vec{k} \cdot \langle u_0^l | \vec{p} | u_0^n \rangle|^2}{E^n(0) - E^l(0)}, \quad (1.11)$$

$$= E^n(0) + \frac{\hbar^2}{2}\vec{k} \cdot \left(\frac{1}{m_{\alpha,\beta}^*} \right) \cdot \vec{k}, \quad (1.12)$$

onde $m_{\alpha,\beta}^*$ é chamada de massa efetiva da n -ésima banda de energia, cujo inverso é definido

como

$$(m_{\alpha,\beta}^*)^{-1} = \frac{\delta_{\alpha,\beta}}{m} + \frac{2}{m^2} \sum_{l \neq n} \frac{\langle u_0^l | \vec{p}_\alpha | u_0^n \rangle \langle u_0^l | \vec{p}_\beta | u_0^n \rangle}{E^n(0) - E^l(0)}. \quad (1.13)$$

A Eq. (1.13) mostra a massa efetiva com um caráter tensorial. Podemos notar que ela pode variar de acordo com a direção do espaço. Um exemplo disso é o caso do fósforo negro [11], onde a massa efetiva possui diferentes valores nas direções X e Y do material.

Outra maneira de calcular a massa efetiva é expandindo em série de Taylor a energia $E^n(\vec{k})$ em torno do ponto $\vec{k} = 0$ da n-ésima banda,

$$E^n(\vec{k}) = E^n(0) + \sum_{\alpha} \frac{\partial E^n}{\partial k_{\alpha}} k_{\alpha} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial^2 E^n}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} k_{\alpha} k_{\beta}. \quad (1.14)$$

Comparando a Eq. (1.12) com a Eq. (1.14), temos

$$\frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\partial^2 E^n}{\partial k_{\alpha} \partial k_{\beta}} k_{\alpha} k_{\beta} = \frac{\hbar^2}{2} \vec{k} \cdot \left(\frac{1}{m_{\alpha,\beta}^*} \right) \cdot \vec{k}. \quad (1.15)$$

A massa efetiva é então escrita como

$$m_{\alpha,\beta} = \frac{\hbar^2}{(\partial^2 E^n / \partial k_{\alpha} \partial k_{\beta})}. \quad (1.16)$$

A partir do modelo de massa efetiva pode-se estudar os portadores de carga em semicondutores como sendo uma quasi-partícula cuja massa é dada pela Eq. (1.16). Isto é, podemos estudar de forma equivalente um elétron sob influência de poços de potenciais periódicos, que representam a rede atômica, como sendo uma quasi-partícula com a mesma carga do elétron, mas estando livre dos potenciais do átomo da rede, de modo que essa informação está contida na massa efetiva.

1.3 Pontos quânticos

O confinamento dos portadores de carga pode ocorrer em uma, duas ou três dimensões do espaço. Nos poços quânticos o confinamento de portadores de carga ocorre em uma dimensão (confinamento 2D), nos fios quânticos em duas dimensões (confinamento 1D) e nos pontos quânticos em três (confinamento 0D) [12].

Pontos quânticos são heteroestruturas baseadas em semicondutores que permitem o confinamento dos portadores de carga nas três dimensões, fazendo com que a quantização dos estados eletrônicos aconteça [13]. Pontos quânticos em meios coloidais foram mencionados primeiro em 1982, sendo esse termo criado apenas em 1984 [14]. Eles são referidos na literatura como átomos artificiais [14, 15]. A Fig. 5 representa três tipos diferentes de pontos quânticos

auto crescidos. Um ponto quântico auto crescido, que consiste num método de criação de pontos quânticos, possui suas dimensões da base (plano XY) bem maiores do que sua altura (eixo Z). Sendo assim, a energia na qual ocorrem transições eletrônicas no espectro na direção Z é bem maior do que as energias de transições nas direções X e Y . Isso nos permite então realizar um estudo deste sistema apenas nas direções X e Y como uma boa aproximação [13].

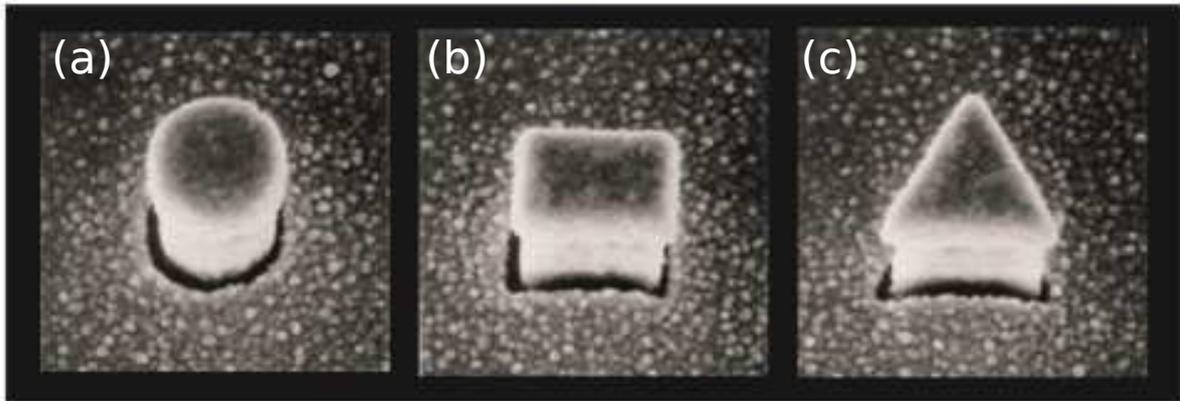


Figura 5: Representação de três pontos quânticos auto crescidos: (a) circular, (b) quadrado e (c) triangular. Figura retirada de Ref. [19].

Os pontos quânticos podem ser fabricados a partir de síntese química de nanocristais coloidais [14, 16] e métodos de epitaxia [14, 17], algumas vezes somados à métodos litográficos. Uma das aplicações dos pontos quânticos são na fabricação de fotodetectores ou de emissores de luz, este último aplicados em TVs [18].

O crescimento epitaxial de um material A sobre um material B, com os materiais possuindo distâncias entre os planos cristalinos, ou parâmetros de rede distintos, pode ocorrer de três formas diferentes, como mostra a Fig. 6: do tipo Frank-van der Merwe, Stranski-Krastanov e crescimento do tipo Volmer-Weber [17]. O crescimento do tipo Frank-van der Merwe corresponde ao crescimento onde os materiais possuem parâmetros de rede parecidos. A formação da heteroestrutura ocorre de camada em camada e o parâmetro de rede tanto do substrato quanto do material depositado se tornam iguais. O crescimento do tipo Volmer-Weber ocorre quando os materiais possuem diferenças consideráveis no parâmetro de rede: o material depositado possui maior energia de ligação do que o substrato, ocorrendo a formação de aglomerados do material que foi depositado. Esse crescimento é conhecido como modo de crescimento de ilhas que são consideradas pontos quânticos [17]. O último tipo de crescimento é o de Stranski-Krastanov: nesse modo, ocorre uma tensão mecânica devido à camada de crescimento admitir um parâmetro de rede igual ao do substrato. Essa tensão aumenta à medida que o material é depositado. Ao se atingir uma espessura crítica, a formação de ilhas (pontos quânticos) de forma coerente começa a acontecer, uma vez que a tensão já não consegue ser mantida [17].

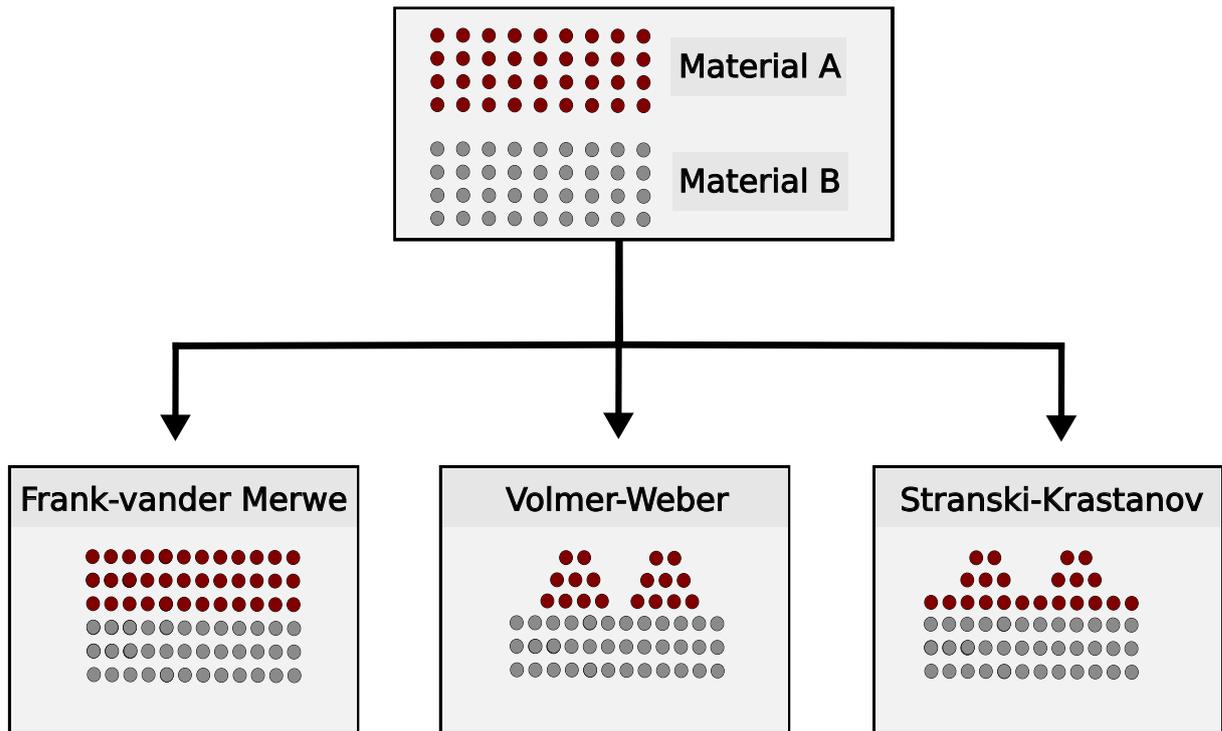


Figura 6: Diferentes métodos de crescimento epitaxial, método de Frank-van der Merwe, Stranski-Krastanov e crescimento do tipo Volmer-Weber. Figura modificada de Ref. [17].

1.4 Fotodetectores

Os fotodetectores são divididos principalmente em fotodetectores intrínsecos (sem dopagem) e extrínsecos (com dopagem)[3, 5]. Os detectores intrínsecos baseiam seu funcionamento na interação dos fótons com elétrons do material, excitando o elétron da banda de valência para a banda de condução, surgindo assim uma corrente. Os fotodetectores extrínsecos funcionam a partir da interação de um fóton com os elétrons das impurezas.

Fotodetectores intrínsecos costumam ser formados pela junção de dois materiais diferentes em heteroestruturas, onde ocorre o confinamento do elétron proveniente da diferença entre a banda de valência e banda de condução dos diferentes materiais de que eles são feitos. Os principais tipos desses detectores são os baseados em poços quânticos (com siglas em inglês *quantum well infrared photodetector*, QWIP) e em pontos quânticos (do inglês *quantum dot infrared photodetector*, QDIP).

O confinamento dos QWIP ocorre nas duas dimensões e sua fabricação é feita a partir da junção de dois materiais de *gaps* diferentes entre dois materiais de *gaps* maiores, heteroestruturas. O confinamento dos portadores pode acontecer de acordo com a largura do poço e com a discretização da banda de energia. Nos QDIP ocorre nas três dimensões devido ao crescimento de ilhas tridimensionais pequenas dentro material de menor *gap* [5]. Quando um portador de carga se excita e atinge um estado no qual é possível fluir, como quando ele atinge um estado acima da barreira de potencial ou onde exista probabilidade significativa de

tunelamento, gera-se uma fotocorrente que pode ser medida e a radiação detectada.

O confinamento de elétrons nos pontos quânticos pode ser utilizado no funcionamento tanto de lasers quanto de fotodetectores. No caso de fotodetectores, se for possível excitar um elétron confinado para um estado onde esteja livre para gerar uma fotocorrente. Já no caso dos lasers, se for possível a liberação de fótons quando o elétron passa para um estado de energia menor. As transições entre um nível de energia mais alto e um baixo ocorre mediante a emissão de fótons cuja energia é bem definida, e essa emissão pode ser utilizada para a fabricação de um laser. Por outro lado, transições entre estados de menor energia para um de maior energia ocorre absorvendo fótons de energia bem definida, e a partir desse mecanismo, um dispositivo fotodetector pode ser fabricado [20].

A frequência THz possui crescente interesse em ser estudada devido a seu potencial em transmissões que envolvem altas velocidades [21]. Algumas das características de possíveis aplicações são: downloads ultrarrápidos, latência de microssegundos e transferências perfeitas. Tendo a possibilidade de revolucionar a forma como as pessoas se comunicam ou acessam informações. Sua dificuldade é por ainda precisa de mais estudos para otimização de dispositivos que operam em THz [21] Trabalhos mostram que esses dispositivos poderiam ser aplicados na área da comunicação a curta distância, tendo um potencial para substituir a comunicação fundamentada em GHz como comunicações via Bluetooth ou Wireless [21–23]. Devido a essa frequência ser pouco utilizada em dispositivos, ela sofre menos interferência com o meio e fatores atmosféricos surgindo um interesse ainda maior em estudá-la [22,23]. Uma meio de estudar dispositivos em THz é através dos QWIP e QDIP.

Um dispositivo que emite radiação na faixa de frequência THz é o laser de cascata quântico (QCLs do inglês *Quantum Cascade Lasers*)[26,27]. Foi primeiramente evidenciado em 1994 por uma equipe liderada por Jerome Faist e Federico Capasso da AT&A Bell laboratories. Estes dispositivos consistem em lasers semicondutores de injeção baseados nas transições intersub-bandas de uma heteroestrutura formada por múltiplos poços quânticos [28], sendo representado esquematicamente na Fig. 7. Os QCLs são fabricados a partir de técnicas de crescimento epitaxial. Eles funcionam a partir de saltos quânticos do elétron, passando para níveis de energia menores e gerando fótons através do processo. Um elétron na banda de condução emite um fóton ao passar para um estado de menor energia no poço. Posteriormente, o mesmo elétron pode tunelar para outro poço adjacente. O processo anterior pode ser repetido permitindo o tunelamento para o próximo poço. O processo é, então, repetido liberando vários fótons. Para que haja essa emissão de fótons em cascata, regiões ativas do laser são intercaladas com materiais dopados e uma tensão de polarização é aplicada no sistema[26].

Outro possível dispositivo para fotodeteção na faixa THz foi proposto em 2011 por Degani *et al.*[29]. Neste trabalho, foi proposto um dispositivo QWIP onde um poço quântico

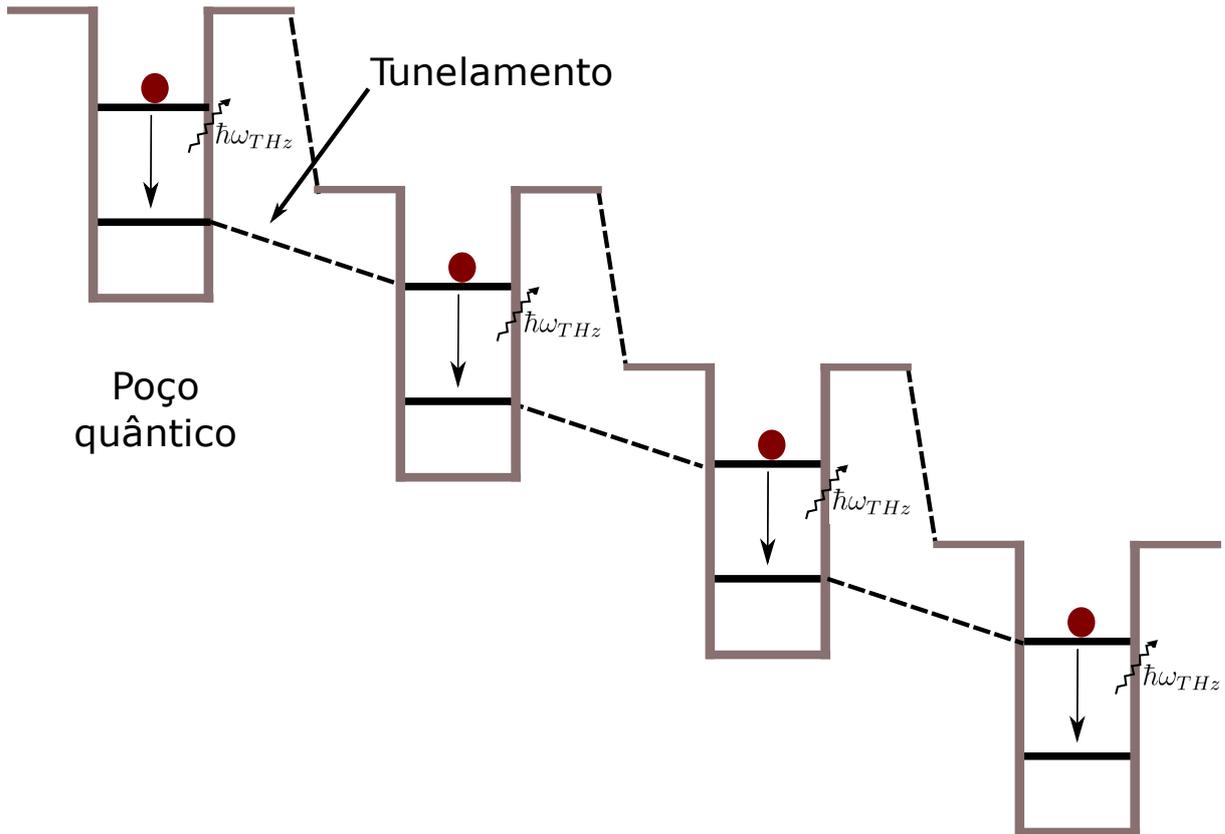


Figura 7: Representação QCL onde ocorre a emissão de fótons devido à transição de um portador de carga para um estado de energia menor em um poço, e, então, o tunelamento para o poço seguinte, cuja energia é menor, o processo é repetido. Figura modificada de Ref. [26].

é posto entre duas barreiras de potenciais. Foi verificado um aumento da seletividade na modulação dos estados contínuos em comparação com o sistema representado por um poço quadrado. Isto será explicado com maior detalhe posteriormente. Motivados a partir desse trabalho e do sistema QCL, propomos um dispositivo fotodetector baseado em ponto quântico, onde o ponto é intercalado por duas barreiras de potenciais. Verificamos a presença de fotocorrentes para determinadas frequências de fótons incidentes, na faixa THz.

1.5 Evolução temporal pelo método *split-operator*

Uma maneira de se estudar QWIP e QDIP é através de métodos computacionais que analisam a dinâmica das funções de onda em tempo real. O método *Split-Operator* é um exemplo com o qual podemos encontrar até mesmo os autoestados do sistema e algumas de suas propriedades físicas. O método possui esse nome por dividir o problema em várias etapas, como será explicado mais adiante. O método *Split-Operator* consiste em reescrever a exponencial de dois operadores que não comutam de uma forma mais conveniente, onde as exponenciais de cada termo do Hamiltoniano são tratadas de forma separada.

Apesar de ser um método desenvolvido para o estudo da equação de Schrödinger

dependente do tempo, ele pode ser usado também até mesmo para cálculo de autoestado. Uma vez que os autoestados formam uma base ortogonal, qualquer função de onda pode ser escrita como uma combinação linear deles. A evolução no tempo imaginário consiste em permutar it por τ nessa expansão e, ao propagarmos uma função inicial arbitrária durante um tempo imaginário muito grande, isto é $\tau \rightarrow \infty$, ela irá convergir para o estado fundamental do sistema. A partir do processo de ortonormalização de Gram-Schmidt [8] podemos encontrar uma função de onda ortogonal ao estado fundamental e sua expansão em autoestados não poderá depender do mesmo. Neste caso, veremos que ao fazermos τ muito grande, vamos encontrar o primeiro estado excitado. O procedimento é repetido e os outros autoestados podem ser encontrados. O método descrito acima será mostrado em detalhes no próximo capítulo (Capítulo 2).

1.6 Confinamento quântico em sistemas classicamente livres

O confinamento de estados quânticos é estudado em estruturas desde fios T, fios quânticos *v-groove* e anéis quânticos [8] até em pontos quânticos emissores de luz (QLEDs) [18, 30], sendo este último já aplicado atualmente na fabricação de TVs. Em algumas estruturas quânticas, a geometria pode levar ao confinamento do portador que, quando analisado do ponto de vista da mecânica clássica se comportam como partículas livres, mas do ponto de vista quântico a descrição leva a estados ligados. Exemplos disso são os fios T, já citados anteriormente, assim como os fios em V [31, 32].

Os fios T consistem em uma junção de dois poços (ou canais) quânticos [8, 33, 34]. A Fig. 8 representa a microscopia de transmissão eletrônica (do inglês *transmission electron microscopy*, TEM) para fios T feitos de GaAs, onde os braços dos fios possuem espessura 6 nm e a base 14 nm. Os fios estão separados por poços de largura 42 nm. Classicamente, uma partícula nessa estrutura não estaria confinada, podendo então se mover livremente nesses canais. Porém, do ponto de vista quântico, os estados confinados surgem, devido à junção dos poços quânticos que formam a estrutura, formando-se assim um espectro de energias discretas na região dos poços. Se um elétron que está na junção dos canais possui uma energia menor que a menor energia do espectro, o mesmo não poderá se propagar, estando assim confinado na junção.

Os fios quânticos *v-grooves* correspondem a estruturas quânticas no formato em v, como pode ser visto na Fig. 9. Eles são fabricados através do MBE [31, 32] da seguinte maneira: sobre uma base sólida é depositado o substrato, material A, no formato em V. Então, um material B, que formará o fio, é depositado sobre a camada anterior. O processo é repetido, formando outro fio quântico. Finalmente, o substrato é depositado novamente. Esse processo é ilustrado na Fig. 10.

O confinamento ocorre nesse tipo de material devido à geometria do fio, onde os

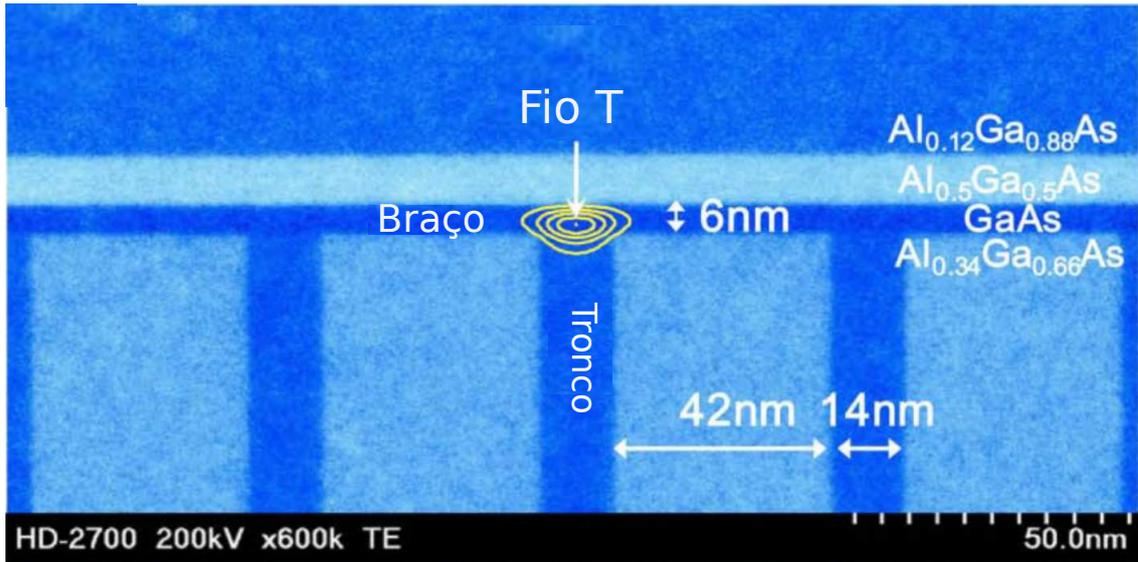


Figura 8: TEM para fios T separados por uma barreira de potencial de 42 nm. A espessura dos braços e do tronco do fio T são 6 nm e 14 nm, respectivamente. Figura retirada de Ref. [35].

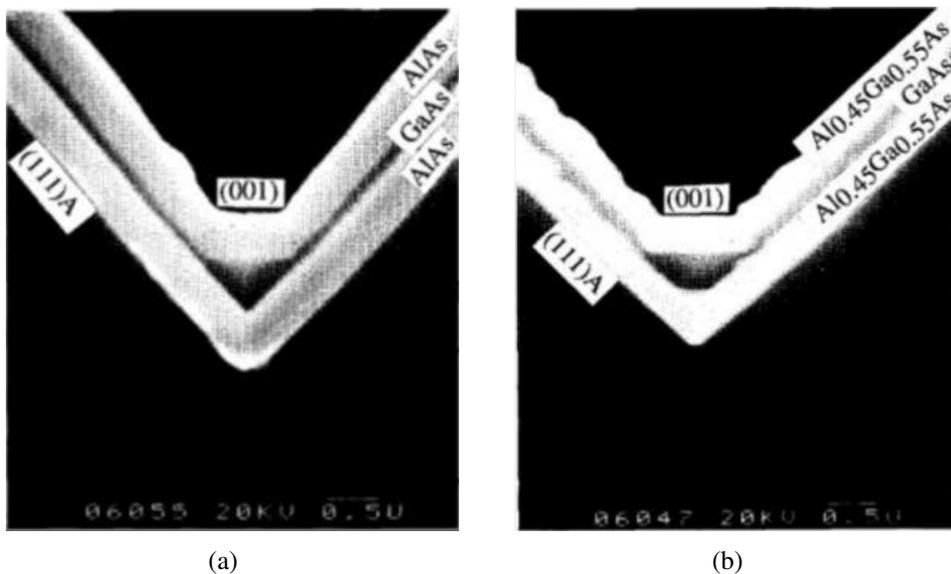


Figura 9: Parte de um fio quântico no formato V com subtrato de GaAs e formado por: (a) AlAs; (b) $\text{Al}_{0.45}\text{Ga}_{0.55}\text{As}$. Figura retirada de Ref. [32].

elétrons são mais confinados nas regiões que possuem uma curvatura maior [36, 37]. Outro motivo para o confinamento ocorre quando uma largura maior é notada na região da curvatura, o que geralmente ocorre na formação dessa estrutura. Isso faz com que a energia do estado fundamental seja menor nessa região e, portanto, o elétron esteja confinado. A Fig. 11 mostra a densidade de probabilidade no estado fundamental para três casos diferentes de fios: (a) um plano sem curvatura, onde não existe confinamento em fio; (b) um plano com curvatura abrupta; (c) uma curvatura mais suave; (d) primeiro estado excitado para o mesmo caso de (c).

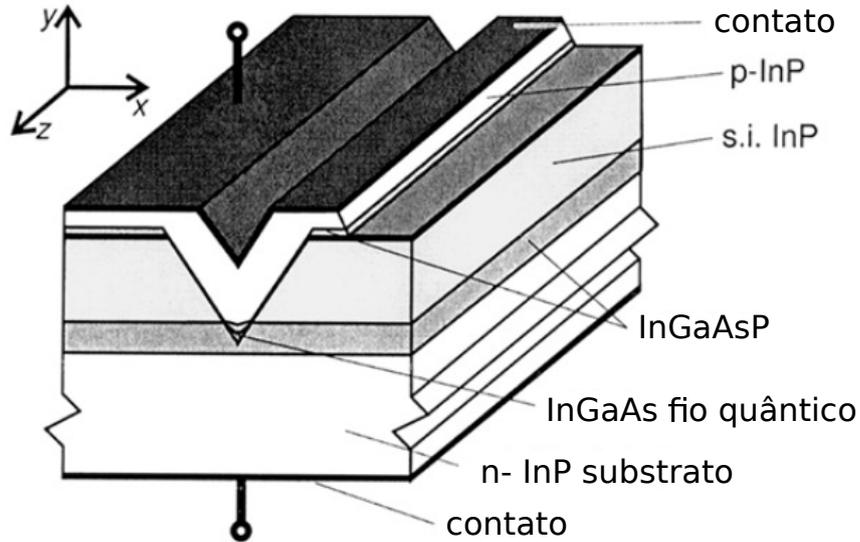


Figura 10: Esquematização da fabricação de um fio formado de InGaAs/InP. Figura retirada de Ref. [31].

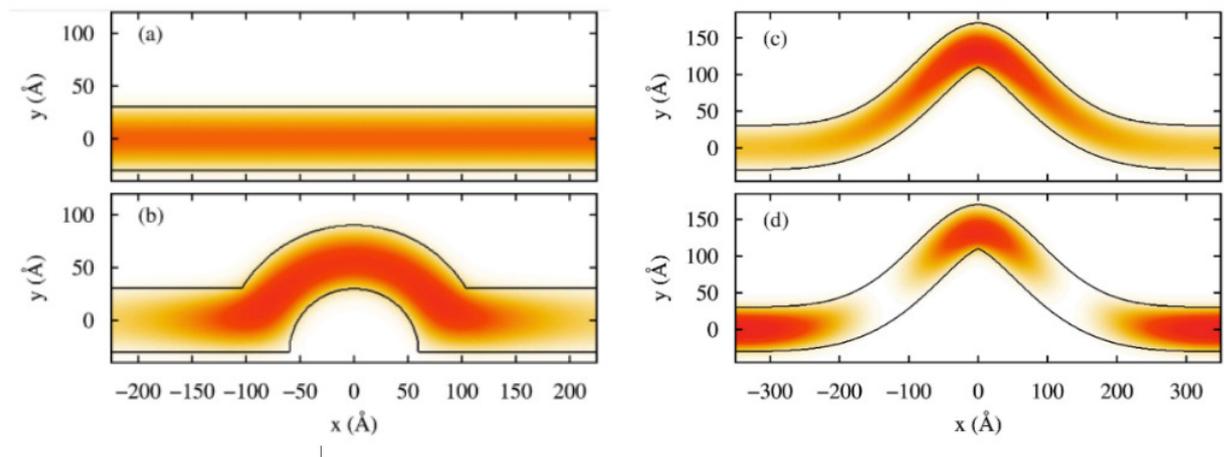


Figura 11: Densidade de probabilidade do estado fundamental para fios *v-groove* de diferentes formatos: (a) planar (sem curvatura); (b) com curvatura abrupta; (c) estado fundamental para uma curvatura suave; (d) primeiro estado excitado para o mesmo caso de (c). Figura retirada de Ref. [36].

1.7 QDIP de ponto circular com canais e constrições

Neste trabalho, é estudado uma estrutura onde existem dois canais laterais que se estreitam, passando a ter uma largura menor, e se conectam a um círculo, como será detalhado mais adiante. Os canais laterais são considerados poços de potenciais, enquanto o círculo é considerado um ponto quântico, como veremos adiante. Sem nenhuma interação com campos externos, um portador de carga que está no estado fundamental do ponto está confinado quanticamente, pois ele não possui energia suficiente para atingir as energias do estado fundamental

dos poços formados pelos canais. Logo em seguida, fazemos a luz interagir com o sistema. A interação pode excitar o elétron para um estado do ponto no qual ele possa transitar para os canais e, assim, produzir corrente. É interessante notar que o sistema é confinado quanticamente devido ao espectro de energias da união dos poços com o ponto, mas não classicamente, como no caso dos fios T mencionado anteriormente. As energias nas quais ocorre a fotocorrente são bem definidas e na faixa THz, como veremos com mais detalhes no Capítulo 3 desta tese.

1.8 Escopo da tese

No Capítulo 2 deste trabalho, apresentamos o método computacional *split-operator* para resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, fazendo a evolução no tempo imaginário para encontrarmos os autoestados de um Hamiltoniano. No Capítulo 3, utilizamos esse método para encontrarmos os autoestados do sistema para um QDIP, encontrando algumas propriedades para um sistema que possui um potencial como sendo zero dentro de dois canais laterais, zero dentro de um círculo que separa os dois canais e infinito fora dessa região. Neste capítulo é mostrado os resultados que foram obtidos para esse sistema na presença de luz, no qual a fotocorrente do dispositivo é calculada, identificando dois picos mais visíveis para frequências de luz incidente diferentes que operam na região do THz. São observados transições de ordem não linear no pico de maior frequência, que são identificadas como sendo de segunda ordem devido a dependência de ordem quatro da fotocorrente em função do campo elétrico da luz. A intensidade da transição do pico de frequência menor é linear com a intensidade da luz, levando a uma dependência quadrática em relação ao campo. Foi observado que as frequências dos picos de fotocorrente dependem de propriedades do sistema como raio do ponto e as constrições em canais laterais. No Capítulo 4, apresentamos a conclusão e as principais perspectivas deste trabalho. No Apêndice A pode-se encontrar algumas demonstrações matemáticas, cujos resultados foram utilizadas no Capítulo 2. No Apêndice B está a imagem do artigo publicado como resultado deste trabalho.

2 METODOLOGIA: MÉTODO SPLIT OPERATOR

Uma maneira de se calcular a evolução temporal de um pacote de onda é encontrar os autoestados e as autoenergias do sistema, fazendo então a expansão do pacote de onda inicial nos autoestados e depois a propagação no tempo real do mesmo [38]. Porém, encontrar computacionalmente o espectro de energias é uma tarefa árdua e por isso os métodos computacionais tais como a expansão nos polinômios de Chebyshev [8, 38–40] e o *split operator* [38, 41, 42] utilizam uma abordagem matemática diferente para resolver a equação de Dirac ou a de Schrödinger dependente do tempo, como discutiremos a seguir.

A partir da propagação dos pacotes de onda podemos estudar propriedades eletrônicas e de transporte em sistemas de baixa dimensionalidade [38], nos permitindo assim obter o espectro de energia [42], densidade local de estados [43], condutividade ótica [44], entre outras propriedades físicas de um dado sistema.

2.1 Soluções para a equação de Schrödinger

A equação de Schrödinger dependente do tempo,

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = - \left(\frac{i}{\hbar} \right) H \psi, \quad (2.1)$$

possui como solução

$$\psi(\vec{r}, t) = U(t, t_0) \psi(\vec{r}, t_0), \quad (2.2)$$

onde $U(t, t_0)$ representa o operador de evolução temporal [41]. Esse operador de evolução temporal possui três formas possíveis diferentes, dependendo de se a Hamiltoniana depende explicitamente do tempo e se para dois instantes de tempo diferentes o comutador entre o Hamiltoniano em um tempo e no outro é nulo ou não, ou seja, se para quaisquer t e t' distintos, $[H(t), H(t')] = 0$ ou $[H(t), H(t')] \neq 0$. O primeiro caso é quando a Hamiltoniana não depende explicitamente do tempo, $V = V(\vec{r})$, então o operador de evolução temporal é

$$U(t, t_0) = \exp \left[- \frac{i}{\hbar} H(t - t_0) \right]. \quad (2.3)$$

O segundo caso é quando a Hamiltoniana depende explicitamente do tempo e se o comutador $[H(t), H(t')]$ é nulo; o operador $U(t - t_0)$ possui a forma

$$U(t - t_0) = \exp \left[- \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t H(t') dt' \right]. \quad (2.4)$$

O último caso é quando a Hamiltoniana depende explicitamente do tempo e $[H(t), H(t')]$ não é nulo,

$$U(t, t_0) = 1 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{\hbar} \right)^n \int_{t_0}^{t_1} dt_1 \int_{t_0}^{t_2} dt_2 \cdots \int_{t_{n-1}}^t dt_n H(t_1) H(t_2) \cdots H(t_n). \quad (2.5)$$

Neste trabalho, será considerado o caso onde a Hamiltoniana depende explicitamente do tempo e o operador de evolução temporal é definido pela Eq. (2.4).

2.2 Split Operator em coordenadas cartesianas

Seja $\psi(\vec{r}, t)$ uma função de onda e consideremos neste momento, por simplicidade, que a Hamiltoniana do sistema não depende explicitamente do tempo. Podemos expandir a função em série de Taylor em torno do ponto $t = t_0$,

$$\psi(\vec{r}, t_0 + \Delta t) = \psi(\vec{r}, t_0) + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} \left(\frac{\partial^n \psi}{\partial t^n} \right)_{t=t_0} \Delta t^n, \quad (2.6)$$

onde $\Delta t = t - t_0$. A equação de Schrödinger nos mostra que $\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\left(\frac{i}{\hbar}\right) H \psi$, então, substituindo na Eq. (2.6),

$$\psi(\vec{r}, t_0 + \Delta t) = \sum_{n=0}^{\infty} \left[\frac{1}{n!} \left(\frac{-i}{\hbar} H \Delta t \right)^n \right] \psi(\vec{r}, t_0). \quad (2.7)$$

Uma vez que a exponencial pode ser escrita como

$$\exp(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{n!}, \quad (2.8)$$

pode-se identificar o somatório na Eq. (2.7) como uma exponencial, encontrando a Eq. (2.2) Costuma-se na literatura utilizar a forma de Cayley [8, 45] para a exponencial do Hamiltoniano, que consiste em uma aproximação,

$$\exp \left[-\frac{i}{\hbar} H \Delta t \right] \psi(\vec{r}, t) \simeq \frac{1 + \frac{i}{2\hbar} H \Delta t}{1 - \frac{i}{2\hbar} H \Delta t} \psi(\vec{r}, t). \quad (2.9)$$

A Eq. (2.7) com o auxílio da Eq. (2.9) pode ser reescrita de maneira aproximada,

$$\left(1 - \frac{i}{2\hbar} H \Delta t \right) \psi(\vec{r}, t + \Delta t) \simeq \left(1 + \frac{i}{2\hbar} H \Delta t \right) \psi(\vec{r}, t). \quad (2.10)$$

O operador momento da Hamiltoniana pode ser reescrito a partir das diferenças finitas discretizando o espaço e o potencial, encontrando-se assim uma matriz coluna para a função de onda, que já é conhecida do lado direito da Eq. (2.10). A multiplicação desta matriz coluna pelo termo entre parênteses nos fornece outra matriz coluna. A Eq. (2.10) resulta em

uma equação matricial, cuja variável é ψ_i no instante de tempo $t + \Delta t$. Uma vez que as equações matriciais são resolvidas, a função de onda é encontrada para cada instante. Essa equação matricial para o caso unidimensional envolve uma matriz tridiagonal. Já para um problema bidimensional, a matriz que encontramos é uma pentadiagonal e para o caso tridimensional, a matriz encontrada é uma heptadiagonal. No método *split operator*, como veremos a seguir, resolve-se um problema com mais de uma dimensão como sendo uma sequência de problemas unidimensionais [8], facilitando assim a resolução, uma vez que problemas envolvendo matrizes tridiagonais são computacionalmente mais simples que a resolução de problemas com matrizes pentadiagonais ou heptadiagonais.

A exponencial da soma de dois operadores pode ser reescrita como a multiplicação das exponencias apenas se o comutador entre os dois operadores é nulo, isto é, para dois operadores A e B , onde $[A, B] = 0$, podemos escrever $\exp[A + B] = \exp[A]\exp[B]$. Uma vez que os operadores de energia cinética T e o potencial V não comutam, o problema de encontrarmos uma expressão para $\exp[A + B]$ surge. Masuo Suzuki [41, 46] encontrou uma aproximação para este problema. A exponencial pode ser escrita como uma multiplicação da exponencial de termos que dependem dos operadores, para o caso de dois operadores A e B que não comutam,

$$\exp[A + B] = \exp\left[\frac{B}{2}\right] \exp[A] \exp\left[\frac{B}{2}\right]. \quad (2.11)$$

A Eq. (2.11) pode ser substituída na Eq. (2.3) trocando A e B por $-\frac{i}{\hbar}T\Delta t$ e $-\frac{i}{\hbar}V\Delta t$,

$$U(t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(T + V)\Delta t\right] \quad (2.12)$$

$$U(t + \Delta t) \simeq \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}T\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right]. \quad (2.13)$$

A função de onda a partir dessa aproximação se torna,

$$\psi(x, y, z, t + \Delta t) \simeq \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{\hbar}T\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] \psi(x, y, z, t). \quad (2.14)$$

A energia cinética, T , pode ser escrita em função do momento, p ,

$$T = \frac{p^2}{2m}, \quad (2.15)$$

onde m é a massa da partícula e p_x , p_y e p_z são as componentes do momento relacionadas às direções x , y e z respectivamente, de forma que $p^2 = p_x^2 + p_y^2 + p_z^2$. Podemos então escrever o operador p^2 em função das derivadas,

$$p^2 = -\hbar^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \quad (2.16)$$

Substituindo a Eq. (2.16) na função de onda representada pela Eq. (2.14),

$$\psi(x, y, z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] \exp\left[-\frac{ip^2}{2m\hbar}\Delta t\right] \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] \psi(x, y, z, t), \quad (2.17)$$

$$\psi(x, y, z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] \exp\left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\right] \times \quad (2.18)$$

$$\exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] \psi(x, y, z, t). \quad (2.19)$$

O primeiro passo para encontrarmos a função de onda para um tempo posterior, $\psi(x, y, z, t + \Delta t)$, é dividir a resolução em três etapas correspondentes à aplicação de cada uma das exponenciais existentes na Eq. (2.19). A primeira etapa consiste em multiplicar o termo exponencial que depende do potencial. A segunda etapa é encontrarmos uma solução para a exponencial das derivadas, mas uma vez que os momentos nas direções X , Y e Z comutam, podemos escrever a exponencial desses operados como sendo a multiplicação dos mesmos, dividindo esta etapa em três subetapas que correspondem a cada uma das dimensões. Discretizamos então a equação e, para cada uma das dimensões, encontramos uma equação matricial envolvendo uma matriz tridiagonal. A terceira etapa é aplicarmos a exponencial que depende do potencial novamente.

Definimos $\xi(x, y, z, t)$ como sendo a última exponencial que depende do potencial, aplicada na função de onda na Eq. (2.19),

$$\xi(x, y, z, t) = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] \psi(x, y, z, t). \quad (2.20)$$

A Eq. (2.20) é resolvida simplesmente efetuando-se a multiplicação desses dois termos.

Definimos $\eta(x, y, z, t)$ como sendo a aplicação da exponencial do operador que possui os momentos sobre ξ , isto é,

$$\eta(x, y, z, t) = \exp\left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)\right] \xi(x, y, z, t). \quad (2.21)$$

Note que a Eq. (2.21) poderia ser resolvida fazendo-se uma transformação de Fourier para o espaço recíproco: a exponencial que envolve os momentos seria resolvida de maneira mais fácil, bastando efetuar uma multiplicação. Porém, isso nos levaria a um problema com condições de contorno periódicas, o que queremos evitar, como falaremos mais adiante.

Devido aos operadores p_x , p_y e p_z comutarem, ou seja $[p_x, p_y] = [p_x, p_z] = [p_y, p_z] =$

0, podemos escrever a exponencial da Eq. (2.21) como

$$\eta(x, y, z, t) = \exp\left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] \exp\left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right] \exp\left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] \xi(x, y, z, t). \quad (2.22)$$

Resolveremos a Eq. (2.22) por etapas, como foi mencionado anteriormente. A primeira etapa consiste em resolver a exponencial do operador momento na direção z aplicado em $\xi(x, y, z, t)$. Definimos

$$\alpha(x, y, z, t) = \exp\left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right] \xi(x, y, z, t). \quad (2.23)$$

Calculamos então a exponencial que envolve o operador momento na direção y aplicado em $\alpha(x, y, z, t)$. Definimos

$$\beta(x, y, z, t) = \exp\left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right] \alpha(x, y, z, t). \quad (2.24)$$

Por último, aplicamos para a direção x . Definimos

$$\gamma(x, y, z, t) = \exp\left[\frac{i\hbar\Delta t}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}\right] \beta(x, y, z, t). \quad (2.25)$$

A Eq. (2.23) pode ser resolvida de uma maneira aproximada a partir da forma de Cayley,

$$\alpha(x, y, z, t) \simeq \left(1 - \frac{i\hbar}{4m} \Delta t \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)^{-1} \left(1 + \frac{i\hbar}{4m} \Delta t \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \xi(x, y, z, t). \quad (2.26)$$

Aplicando o operador $\left(1 - \frac{i\hbar}{4m} \Delta t \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right)$ pela esquerda na Eq. (2.26),

$$\left(1 - \frac{i\hbar}{4m} \Delta t \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \alpha(x, y, z, t) \simeq \left(1 + \frac{i\hbar}{4m} \Delta t \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) \xi(x, y, z, t). \quad (2.27)$$

Encontramos uma equação diferencial,

$$\alpha - \frac{i\hbar}{4m} \Delta t \frac{\partial^2 \alpha}{\partial z^2} = \xi + \frac{i\hbar}{4m} \Delta t \frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2}, \quad (2.28)$$

$$\alpha - \kappa \frac{\partial^2 \alpha}{\partial z^2} = \xi + \kappa \frac{\partial^2 \xi}{\partial z^2}, \quad (2.29)$$

Por simplicidade na escrita, trocamos o símbolo de aproximação por uma igualdade, omitimos a dependência das variáveis nas funções $\alpha(x, y, z, t)$ e $\xi(x, y, z, t)$ e definimos

$$\kappa = \frac{i\hbar}{4m} \Delta t. \quad (2.30)$$

Sabemos a partir da teoria de discretização em diferenças finitas que, para uma

função $f(x, y, z)$, a discretização nos leva às seguintes equações:

$$\frac{\partial}{\partial z} f_{i,j,k} = \frac{f_{i,j,k+1} - f_{i,j,k-1}}{2\Delta z} + E(\Delta z^2), \quad (2.31)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial z^2} f_{i,j,k} = \frac{f_{i,j,k+1} - 2f_{i,j,k} + f_{i,j,k-1}}{\Delta z^2} + E(\Delta z^2), \quad (2.32)$$

onde $E(\Delta z^2)$ representa o erro. No Apêndice A pode ser encontrado uma demonstração para as Eq. (2.31) e Eq. (2.32).

Discretizamos as funções α e ξ em N_x , N_y e N_z pontos nos intervalos $0 \leq x \leq L_x$, $0 \leq y \leq L_y$ e $0 \leq z \leq L_z$, onde a região na qual nosso sistema é definido é uma caixa cujas dimensões são L_x , L_y e L_z . Podemos reescrever a Eq. (2.29) com o auxílio da Eq. (2.32),

$$\alpha_{i,j,k} - \frac{\kappa}{\Delta z^2} (\alpha_{i,j,k-1} - 2\alpha_{i,j,k} + \alpha_{i,j,k+1}) = \xi_{i,j,k} + \frac{\kappa}{\Delta z^2} (\xi_{i,j,k+1} - 2\xi_{i,j,k} + \xi_{i,j,k-1}) \quad (2.33)$$

$$A_1 \alpha_{i,j,k} + B_1 \alpha_{i,j,k+1} + B_1 \alpha_{i,j,k-1} = A_2 \xi_{i,j,k} + B_2 \xi_{i,j,k+1} + B_2 \xi_{i,j,k-1}, \quad (2.34)$$

onde definimos

$$A_1 = 1 + \frac{2\kappa}{\Delta z^2}, \quad (2.35)$$

$$B_1 = -\frac{\kappa}{\Delta z^2}, \quad (2.36)$$

$$A_2 = 1 - \frac{2\kappa}{\Delta z^2}, \quad (2.37)$$

$$B_2 = \frac{\kappa}{\Delta z^2}. \quad (2.38)$$

A condição de contorno finita implica que função de onda fora da região que estamos estudando pelo método se anula, ou seja, $\psi(z) = 0$ se $z \leq 0$ ou se $z \geq L_z$. Uma vez que a função de onda se anula para esses pontos, $\xi_{i,j,k}$ também se anula e conseqüentemente $\alpha_{i,j,0}$ e α_{i,j,N_z} . Aplicando essas condições de contorno na Eq. (2.34) para $k = 1$ encontramos

$$A_1 \alpha_{i,j,1} + B_1 \alpha_{i,j,2} = A_2 \xi_{i,j,1} + B_2 \xi_{i,j,2}. \quad (2.39)$$

Fazendo $k = N_z$ e aplicando as condições de contorno na Eq. (2.34), temos

$$A_1 \alpha_{i,j,N_z} + B_1 \alpha_{i,j,N_z-1} = A_2 \xi_{i,j,N_z} + B_2 \xi_{i,j,N_z-1}. \quad (2.40)$$

As Eq. (2.34), Eq. (2.39) e Eq. (2.40) podem ser agrupadas e escritas na forma matricial,

$$\begin{bmatrix} A_1 & B_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B_1 & A_1 & B_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_1 & A_1 & B_1 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & B_1 & A_1 & B_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & B_1 & A_1 & B_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & B_1 & A_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_{i,j,1} \\ \alpha_{i,j,2} \\ \alpha_{i,j,3} \\ \vdots \\ \alpha_{i,j,N_z-2} \\ \alpha_{i,j,N_z-1} \\ \alpha_{i,j,N_z} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A_2 & B_2 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ B_2 & A_2 & B_2 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B_2 & A_2 & B_2 & \cdots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & B_2 & A_2 & B_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & B_2 & A_2 & B_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & B_2 & A_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \xi_{i,j,1} \\ \xi_{i,j,2} \\ \xi_{i,j,3} \\ \vdots \\ \xi_{i,j,N_z-2} \\ \xi_{i,j,N_z-1} \\ \xi_{i,j,N_z} \end{bmatrix}, \quad (2.41)$$

onde, utilizando as Eq. (2.30), Eq. (2.35), Eq. (2.36), Eq. (2.37) e Eq. (2.38), temos

$$A_1 = 1 + \frac{i\hbar\Delta t}{2m\Delta z^2}, \quad (2.42)$$

$$B_1 = -\frac{i\hbar\Delta t}{4m\Delta z^2}, \quad (2.43)$$

$$A_2 = 1 - \frac{i\hbar\Delta t}{2m\Delta z^2}, \quad (2.44)$$

$$B_2 = \frac{i\hbar\Delta t}{4m\Delta z^2}. \quad (2.45)$$

As matrizes em que aparecem os termos A_i e B_i , com $i = 1$ ou $i = 2$, na Eq. (2.41) são matrizes tridiagonais. Esse sistema pode ser facilmente resolvido computacionalmente, uma vez que o lado direito das equações matriciais da Eq. (2.41) já é conhecido. O procedimento pode ser repetido para encontrarmos as outras N_x e N_y equações correspondentes às direções X e Y , encontrando assim β e γ , definidos nas Eq. (2.24) e Eq. (2.25) respectivamente, e assim, η pode ser encontrado. O último passo para encontrarmos a função de onda para um tempo posterior é aplicarmos a primeira exponencial que depende do potencial do lado direito da Eq. (2.19),

$$\psi(x, y, z, t + \Delta t) = \exp\left[-\frac{i}{2\hbar}V\Delta t\right] \eta(x, y, z, t). \quad (2.46)$$

A equação de Schrödinger pode então ser resolvida como a resolução de sistemas

que envolvem matrizes tridiagonais. Os autoestados do sistema podem ser encontrados evoluindo uma função de onda inicial arbitrária no tempo imaginário, como veremos a seguir.

2.3 Propagação em tempo imaginário

Uma maneira de encontrarmos os autoestados do sistema é realizando a propagação de funções de onda arbitrárias em tempo imaginário. Essa propagação consiste em substituir it por τ na expansão da função de onda e fazer a propagação ao longo de um tempo muito grande. Posteriormente, veremos que encontraremos uma função convergindo ao estado fundamental do sistema. Podemos, então, aplicar a ortonormalização de Gram-Schmidt para encontrar os outros autoestados do sistema.

Seja $|\psi\rangle_t$ uma função de onda qualquer e ϕ_n o n -ésimo autoestado do Hamiltoniano H . Sabemos que a função de onda pode ser expandida em termos desses autoestados, uma vez que eles formam uma base ortogonal do espaço,

$$|\psi\rangle_t = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \exp\left[-\frac{iE_n t}{\hbar}\right] |\phi_n\rangle, \quad (2.47)$$

onde E_n corresponde à autoenergia do n -ésimo autoestado. Substituindo it por τ na Eq. (2.47) e evidenciando o termo que depende da energia do estado fundamental, temos

$$|\psi\rangle_t = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \exp\left[-\frac{E_n \tau}{\hbar}\right] |\phi_n\rangle \quad (2.48)$$

$$|\psi\rangle_t = a_0 \exp\left[-\frac{E_0 \tau}{\hbar}\right] |\phi_0\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \exp\left[-\frac{E_n \tau}{\hbar}\right] |\phi_n\rangle \quad (2.49)$$

$$|\psi\rangle_t = \exp\left[-\frac{E_0 \tau}{\hbar}\right] \left[a_0 |\phi_0\rangle + \sum_{n=1}^{\infty} a_n \exp\left[-\frac{(E_n - E_0) \tau}{\hbar}\right] |\phi_n\rangle \right]. \quad (2.50)$$

Fazendo uma propagação de tempo muito grande na Eq. (2.50), $\tau \rightarrow \infty$, temos que o termo do lado direito da equação que possui o estado fundamental dominará sobre o termo que possui o somatório, uma vez que para $n > 0$, $(E_n - E_0)$ é sempre positivo. Fazendo $\tau \gg \hbar/(E_n - E_0)$, encontraremos o estado fundamental. Utilizando o procedimento de Gram-Schmidt, podemos encontrar uma função de onda que seja ortogonal ao estado fundamental, e podemos repetir o processo anterior. Como a nova função é ortogonal ao estado fundamental, então ao se propagar para um τ grande, a Eq. (2.50) irá convergir para ϕ_1 , o primeiro estado excitado. O procedimento pode ser repetido para encontrar uma função que seja ortogonal ϕ_0 e ϕ_1 e depois, fazendo $\tau \rightarrow \infty$, encontramos ϕ_2 . O procedimento é então repetido para que os autoestados sejam encontrados.

2.4 Condição de Contorno

Um dos primeiros passos a ser em realizados quando resolvemos problemas que envolvem a função de onda computacionalmente é a criação de uma *grid* finita e discreta, limitando assim o espaço a ser trabalhado [8]. Logo a função de onda fora desse espaço se anula e conseqüentemente, por maior que esse espaço seja, temos um problema com condição de contorno finita, que corresponde a um potencial infinito nas bordas do sistema. Portanto, quando limitamos o espaço para a resolução do problema, acabamos criando uma barreira de potencial fictícia nas bordas do sistema.

Um problema então surge quando o sistema é simulado no computador: a função de onda se propaga nessa região pré-definida, mas ao atingir as bordas do sistema ela acaba se refletindo. Essa reflexão não possui sentido físico, uma vez que ao atingir a borda do sistema, espera-se que a função de onda simplesmente saia da caixa computacional. Além disso, essa reflexão pode modificar a solução do nosso problema, interferindo com a própria função de onda e alterando os resultados. Vários métodos surgem na literatura para tentar acabar com esse problema. Alguns métodos consistem em aumentar a região definida para o problema de maneira que a função de onda demore a se propagar até a borda do sistema e os resultados possam ser obtidos antes mesmo da reflexão. Porém, nesse método, aumentar a região pode gerar um gasto computacional muito grande, não sendo algumas vezes viável sua utilização. Já métodos outros consistem em adicionar um potencial imaginário extra para que possa diminuir os efeitos da reflexão.

Essas condições de contorno não-reflexivas se subdividem dependendo do procedimento realizado para sua obtenção [47]. Elas podem ser condições do tipo características, do tipo distante e do tipo zona de absorção. As do tipo característica são condições nas quais se utiliza a equação característica da equação diferencial. Condições do tipo distantes são aquelas onde as condições de fronteiras são encontradas no campo distante. A condição do tipo zona de absorção consiste em adicionar termos a mais no Hamiltoniano para que eles diminuam o efeito da reflexão.

Em 1986 Kosloff e Kosloff [48] sugeriram a adição de um potencial imaginário nas bordas do sistema. Esse potencial absorveria a função de onda pouco a pouco, de modo que ela não atinja as bordas do sistema, evitando sua reflexão. Após esse trabalho, vários outros potenciais foram propostos para evitar tais reflexões, como por exemplo em 1988, por D. Neuhauser e M. Baer [49]. Outro método foi proposto em 2003 por Arnold *et al* [50], onde a equação de Schrödinger dependente do tempo é resolvida pelo método de Laplace utilizando a forma de Cayley e o procedimento de Crank-Nicolson. Neste método, barreiras transparentes e discretas foram desenvolvidas. Manolopoulos [51] sugeriu um potencial imaginário para absorver

a reflexão nas bordas do sistema que é ajustável e depende apenas da direção de propagação x . Neste trabalho foi considerado tal potencial, que é definido como um potencial de zona de absorção, para evitar as reflexões. Um estudo detalhado deste potencial pode ser encontrado em [51]. O potencial imaginário é dado por

$$V_{im}(\bar{x}) = -iE_{min} \left(a\bar{x} - b\bar{x}^3 + \frac{4}{(c-\bar{x})^2} - \frac{4}{(c+\bar{x})^2} \right), \quad (2.51)$$

onde $a = 1 - 16/c^3$, $b = (1 - 17/c^3)/c^2$, $c = 2,62206$ e E_{min} é a menor energia do elétron dada por

$$E_{min} = \frac{\hbar}{2m_c} \left[\frac{c}{2(x_2 - x_1)\delta} \right]^2, \quad (2.52)$$

com o potencial imaginário posicionado entre x_1 e x_2 . O parâmetro de precisão δ foi adotado como 0.2, para obtermos apenas pequenas reflexões. Temos também que

$$\bar{x} = \frac{2\kappa_{min}\delta}{x - x_1}, \quad (2.53)$$

onde $\kappa_{min} = \sqrt{2m_e E_{min}/\hbar^2}$.

3 FOTODETECTORES DE POÇO E PONTO QUÂNTICO

Como já mencionado, nos QWIP o confinamento de portadores ocorre devido ao poço quântico de potencial em uma dimensão. Já no QDIP, o confinamento ocorre em todas as direções. A Fig. 12 representa o funcionamento de detectores baseados em poços quânticos. Nela, observamos a produção de uma corrente que é a soma da fotocorrente e a corrente de escuro (excitações térmicas) para os casos onde a fotocorrente é gerada para o portador que: (a) alcança um estado contínuo no espectro de energia; (b) tunela para sair da região de confinamento. Os QWIP e os QDIP são geralmente fabricados a partir de técnicas de epitaxia discutidas anteriormente.

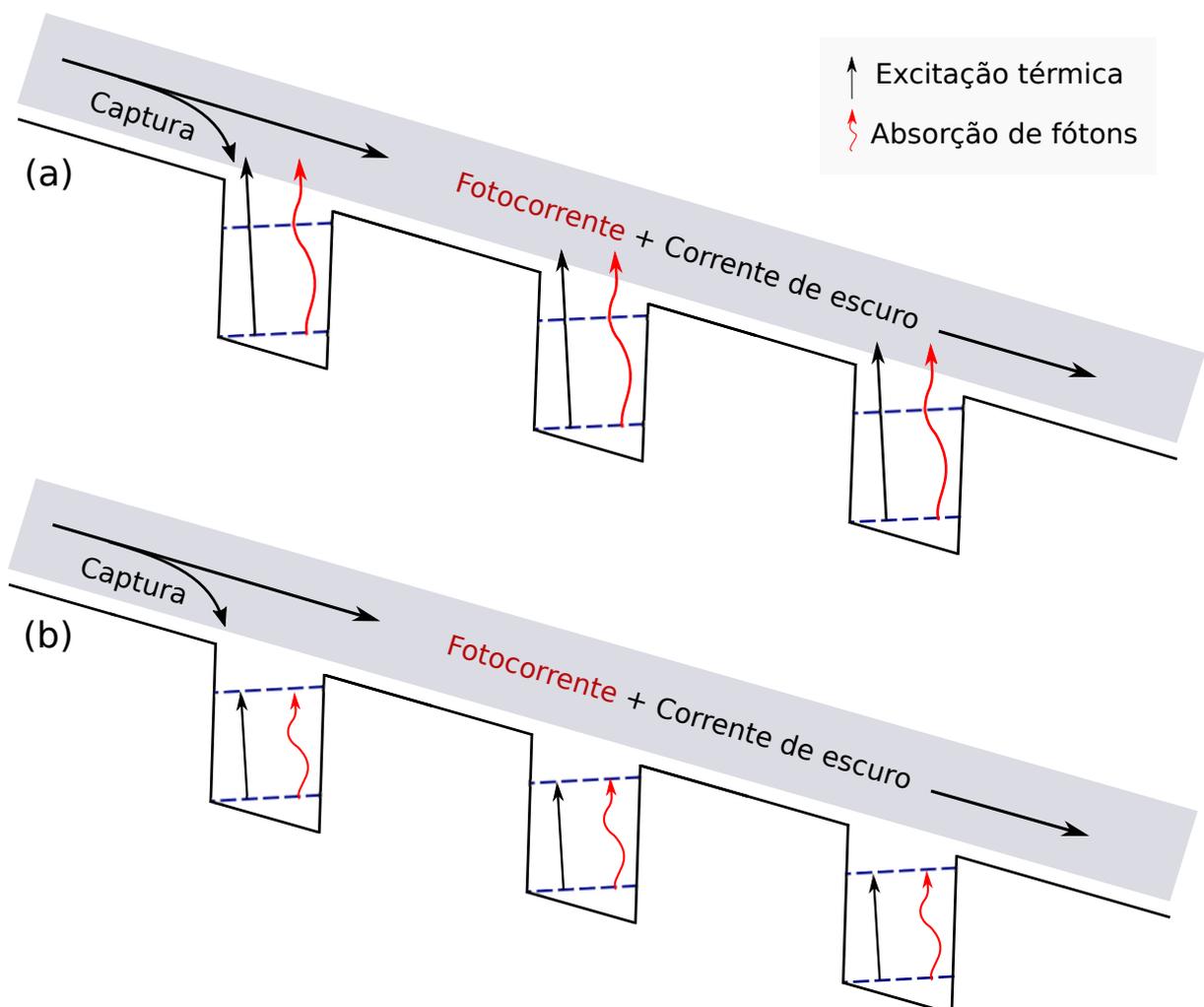


Figura 12: Representação do funcionamento de um fotodetector. (a) Fotodetector onde o portador é excitado e atinge um estado do espectro contínuo de energias, gerando assim uma fotocorrente. (b) Fotodetector onde o portador é excitado para um estado onde ocorre tunelamento para fora da região de confinamento, gerando assim uma fotocorrente. Figura modificada de Ref. [3].

3.1 Ponto quântico envolto por barreiras de potenciais

Degani, Marcos H., *et al.* em 2011 propôs um fotodetector de poço quântico, QWIP, no qual o poço é envolto por barreiras de potenciais. Utilizando o método *split-operator*, foi possível calcular os autoestados do sistema e realizar a evolução no tempo real para calcular algumas propriedades do sistema, como fotocorrente e a corrente escura. Foi percebido que ao inserir barreiras de potencial mais alto ao redor do poço, era possível aumentar a seletividade do dispositivo, uma vez que a faixa de energias para o portador de carga alcançar uma região capaz de gerar uma fotocorrente é maior no poço sem as barreiras do que com o dispositivo proposto. Conseqüentemente, existem frequências bem definidas sendo percebidas pelo dispositivo. A Fig. 13 representa esse QWIP onde vemos: (a) o perfil de potencial proposto no dispositivo, no qual um poço de potencial de largura L é envolto por barreiras de potencial de largura B ; (b) o coeficiente de transmissão como função da energia neste sistema para o caso sem barreiras de potencial (cinza) e com barreiras de potencial (azul). O espectro adquiriu picos mais estreitos em torno das energias para o caso com barreiras, mostrando uma maior seletividade da fotocorrente, pois apresentou uma fotocorrente mais significativa apenas para fótons com energias bem definidas em torno dos picos.

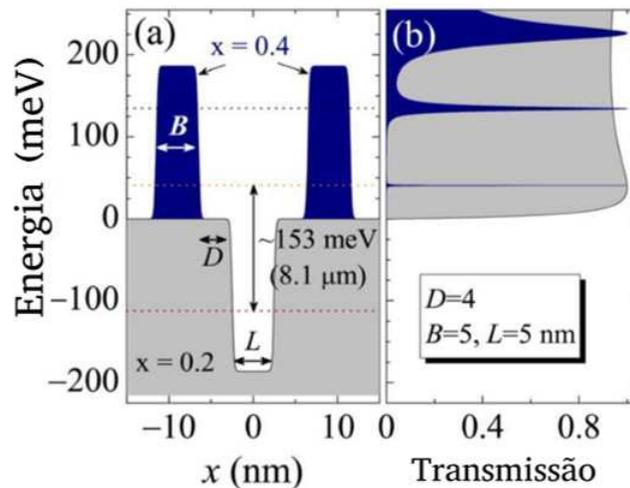


Figura 13: (a) Configuração dos potenciais para o QWIP onde o poço quântico é inserido entre barreiras de potencial (azul) e o potencial para o poço sem as barreiras (cinza); (b) Coeficientes de transmissão para a configuração descrita em (a). Figura modificada da Ref. [29].

Fundamentados no estudo descrito anteriormente para o QWIP, sugerimos um dispositivo fotodetector baseado em um ponto quântico de tal forma que o ponto quântico é intercalado por barreiras de potenciais, como mostra a Fig. 14. O dispositivo é formado por canais laterais pela direita e pela esquerda com largura d_2 . Esses canais se estreitam, ficando com uma largura d_1 . Os canais mais estreitos se estendem por um comprimento L até se ligarem a um

círculo de raio R .

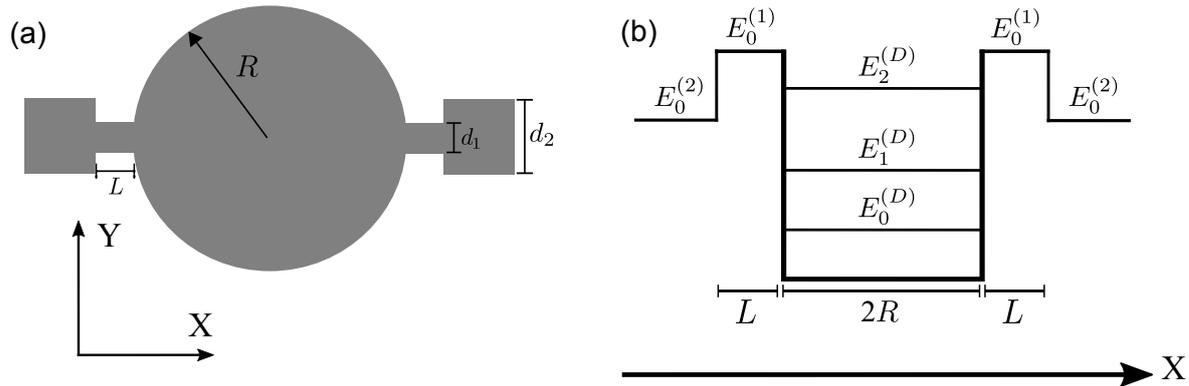


Figura 14: (a) Representação do ponto quântico onde a parte cinza representa o material no qual ele é feito. (b) Energia potencial do sistema e esquema das energias do estado fundamental dos poços de largura d_1 e de largura d_2 , representados por E_0^1 e E_0^2 respectivamente, do estado fundamental do ponto E_0^D e do primeiro e segundo estado excitado, E_1^D e E_2^D respectivamente.

O potencial, $V(x,y)$, para esse sistema é nulo dentro da região dos canais e do círculo (região mais escura na Fig. 14) e fora, V_0 é muito grande comparado ao potencial no interior. Uma representação desse potencial é descrita, tomando a origem no centro do círculo, por

$$V(x,y) = \begin{cases} 0, & \text{se } x^2 + y^2 < R^2, \\ 0, & \text{se } R < |x| < R + L \text{ e } |y| < d_1/2, \\ 0, & \text{se } |x| > R + L \text{ e } |y| < d_2/2, \\ V_0. & \end{cases} \quad (3.1)$$

Os canais podem ser representados como potenciais de poços quadrados finitos de larguras d_1 e d_2 . Para facilitar a nomenclatura, usaremos o índice 1 para representar o poço de largura d_1 e 2 para o poço de largura d_2 . O círculo funciona como um ponto quântico, uma vez que ele é limitado nas três regiões do espaço. Na direção X , a limitação ocorre devido a energia do estado fundamental do ponto ser menor do que a energia do estado fundamental do primeiro canal (comprimento d_1), portanto, sem a presença de interações externas, um portador de carga que está no estado fundamental do ponto não possui energia suficiente para sair dessa configuração. A Fig. 14(b) representa esta configuração de energias, onde E_0^D representam a energia fundamental, E_1^D e E_2^D o primeiro estado e o segundo estado excitado do ponto quântico, $E_0^{(1)}$ representa o estado fundamental do primeiro poço e $E_0^{(2)}$ a energia do segundo poço. Na direção Y , o confinamento ocorre simplesmente devido aos potenciais externos. Já na direção Z , ele ocorre devido ao comprimento das camadas de materiais na direção Z ser muito pequena em relação aos comprimentos nas direções X e Y , fazendo com que o portador, antes de ir para outros níveis de energia em Z , prefira transições em X e Y devido à energia

ser muita alta entre as transições em Z , ocorrendo assim o confinamento e a formação de um ponto quântico. Este sistema pode ser obtido não só a partir das técnicas de epitaxia descritas anteriormente usando, por exemplo, semicondutores III-V, como também a partir de litografia em novos semicondutores 2D.

Primeiramente, uma prova do funcionamento do dispositivo é realizada calculando a probabilidade de transmissão do sistema esquematizado na Fig. 14(a) a partir do método de matriz de transferência, utilizando o pacote computacional Kwant [52]. A Fig. 15 representa a probabilidade de transmissão de um portador de carga que está no canal do lado esquerdo do ponto para o canal do lado direito, assumindo $R = 110 \text{ \AA}$, $d_2 = 100 \text{ \AA}$ e três constrições d_1 distintas: 45 \AA , 75 \AA e 100 \AA . As linhas pontilhadas verdes e verticais representam a energia do primeiro e do segundo estado excitado do ponto, $E_1^{(D)}$ e $E_2^{(D)}$, respectivamente. Para $d_1 = 45 \text{ \AA}$, portadores de carga com energia menor que $\approx 50 \text{ meV}$, apesar de terem energia suficiente para popular o estado de menor energia do segundo poço, 39 meV , não transmitem para o outro lado. O transporte ocorre quando a energia dos elétrons é em torno das energias do ponto $E_1^{(D)}$ e $E_2^{(D)}$. À medida que d_1 diminui, o pico da transmissão ocorre em faixas cada vez mais bem definidas de energia, como pode ser visto na Fig. 15. Isso ocorre porque à medida que se aumenta as larguras dos poços, faz-se com que cada vez mais não se tenha diferenças entre as configurações e, conseqüentemente, entre as energias. Então, quando não existe diferença entre os dois poços, $d_1 = d_2 = 100 \text{ \AA}$, a probabilidade de transmissão é próxima de 1, mesmo em energias abaixo de $E_1^{(D)}$. O pico ocorre um pouco antes das energias do ponto devido à abertura dos canais laterais alterar as propriedades do ponto, diminuindo sua energia e antecipando o transporte.

Uma vez que a prova de conceito é estabelecida, uma análise diferente da anterior é feita: consideramos agora um elétron inicialmente preso no estado fundamental do ponto, sendo excitado pela interação com a luz incidente. O Hamiltoniano para um elétron na banda de condução, com a aproximação da massa efetiva, é

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + V(x, y) - eyE_{dyn} \cos(\omega t) - exE_{st}, \quad (3.2)$$

onde m^* é a massa efetiva no material, $V(x, y)$ é o potencial devido ao *band-offset* do material definido na Eq. (3.1), E_{dyn} é a amplitude do campo elétrico oscilante com frequência ω devido à luz polarizada na direção Y e E_{st} é a amplitude de um campo elétrico estático externo ao sistema, aplicado na direção X . Neste trabalho, foi utilizada a massa efetiva do GaAs, $m^* = 0.067m_0$, onde m_0 é a massa do elétron.

Primeiramente, calculamos os autoestados para um sistema onde não há interação da luz com o elétron ($E_{dyn} = 0$). Fazemos isso com a técnica de evolução em tempo imaginário descrita no Cap. 2.3 desta tese. Consideramos a solução do estado fundamental como sendo o

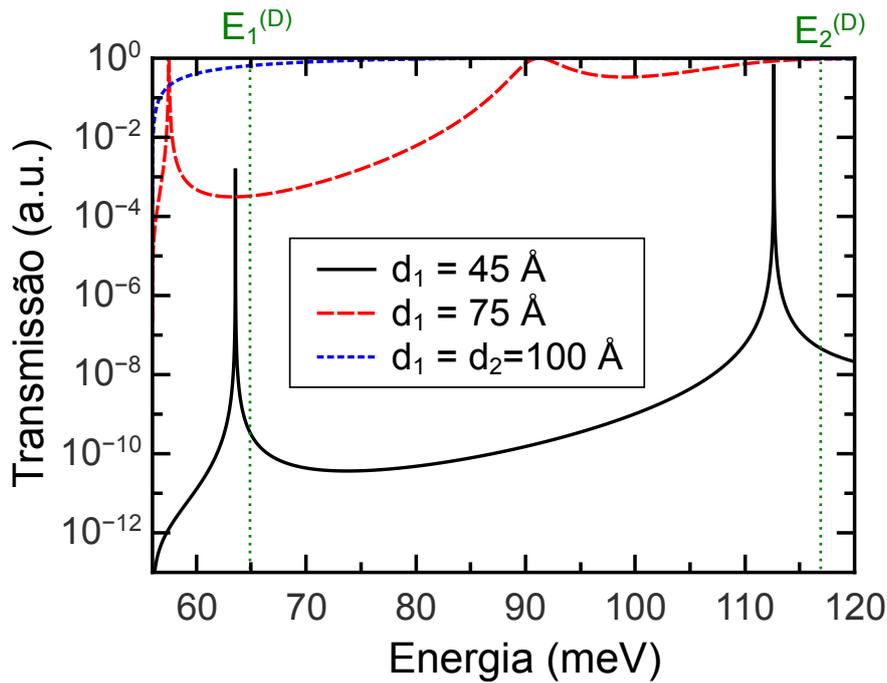


Figura 15: Probabilidade de transmissão em função da energia da luz para o raio do ponto $R = 110 \text{ \AA}$, constrição de largura maior $d_2 = 100 \text{ \AA}$ e três constrições menores diferentes: $d_1 = 45 \text{ \AA}$ (linha preta), $d_1 = 75 \text{ \AA}$ (tracejado vermelho) e $d_1 = 100 \text{ \AA}$ (pontilhado azul). A linha pontilhada vertical verde representa a energia para o primeiro E_1^D e segundo E_2^D estados excitados do ponto, respectivamente.

estado inicial, $\psi(\vec{r}, 0)$, e então fazemos sua evolução no tempo real,

$$\psi(\vec{r}, t + \Delta t) = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} H(t') dt' \right] \psi(\vec{r}, t). \quad (3.3)$$

Uma vez que os operadores de energia cinética, T , e potencial, V , não comutam, a aproximação da exponencial para Hamiltonianos que dependem do tempo, descrita pela Eq. (2.11), pode ser utilizada,

$$\begin{aligned} \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_t^{t+\Delta t} H(t') dt' \right] &= \exp \left[-\int_t^{t+\Delta t} \frac{i}{2\hbar} V'(\vec{r}, t') dt' \right] \exp \left[\frac{i\hbar}{2m^*} \Delta t \nabla^2 \right] \\ &\times \exp \left[-\int_t^{t+\Delta t} \frac{i}{2\hbar} V'(\vec{r}, t') dt' \right] + O(\Delta t^3), \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde $O(\Delta t^3)$ é um erro, que pode ser negligenciado para pequenos passos de tempo Δt , e $V'(\vec{r}, t)$ é a soma do potencial devido ao *band-offset*, a interação da luz e o campo externo,

$$V'(\vec{r}, t) = V(\vec{r}) - eyE_{dyn} \cos(\omega t) - exE_{st}. \quad (3.5)$$

A integral da parte potencial da Eq. (3.4) é calculada substituindo $V'(\vec{r}, t)$ na Eq. (3.5),

$$\int_t^{t+\Delta t} V'(\vec{r}, t') dt' = (V - exE_{st})\Delta t - \frac{2eyE_{dyn}}{\omega} \cos\left[\frac{2\omega t + \omega\Delta t}{2}\right] \sin\left[\frac{\omega\Delta t}{2}\right]. \quad (3.6)$$

A densidade de corrente $\bar{J}(x_P, t)$ no canal de largura d_2 é calculada somando as correntes em Y , para um ponto fixo em X localizado no canal de largura d_2 ,

$$\bar{J}_{(x_P)} = \frac{\hbar}{m} \int_{-\infty}^{\infty} \Im \left[\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} \Big|_{x_P} \right] dy, \quad (3.7)$$

onde $P = D, E$, representando um ponto em x onde a corrente é calculada para o lado direito ou esquerdo, respectivamente. Para calcular tal densidade computacionalmente, se faz necessário escrever a derivada em diferenças finitas,

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\psi(x + \Delta x) - \psi(x - \Delta x)}{2\Delta x}. \quad (3.8)$$

A densidade de corrente total, J , calculada em um dos braços é a soma das correntes J_{x_P} desde o tempo inicial $t = 0$ até um tempo máximo no qual a simulação acaba, $t = T_{max}$,

$$J = \int_0^{T_{max}} J_{x_P} dt. \quad (3.9)$$

Então, consideramos o estado inicial como sendo o estado fundamental e realizamos a evolução no tempo real, considerando a interação com a luz, $E_{dyn} \neq 0$. A evolução é realizada até o tempo máximo da simulação: neste caso, utilizamos $T_{max} = 2000fs$. Primeiramente, o sistema é estudado sem atuação de um campo estático externo, $E_{st} = 0$.

Quando um fóton interage com o sistema, ele pode excitar um portador de carga para um estado de energia no qual ele seja capaz de passar para um estado que se propaga ao longo dos canais. Neste caso, uma fotocorrente é gerada. Essa fotocorrente só pode ser gerada para frequências bem definida dos fótons, pois ele precisa ser capaz de excitar esse portador entre dois níveis discretos do ponto. Na Fig. 16, a fotocorrente é calculada em função da energia do fóton incidente. É importante notar que a mesma possui um pico em poucas dezenas de meV, mesmo para o caso onde não existe constrição, isto é $d_1 = d_2 = 100 \text{ \AA}$, representado na Fig. 16(a), logo, os picos estão sendo formados na frequência THz. À medida que a constrição diminui, como em $d_1 = 75 \text{ \AA}$, os picos ficam cada vez mais estreitos, como pode ser visto na Fig. 16(b), até que dois picos distintos podem ser observados claramente na Fig. 16(c) com $d_1 = 45 \text{ \AA}$. O gráfico mostra também que o segundo pico analisado, o de maior energia, possui uma fotocorrente menor em relação ao de menor energia.

Observando o pico da Fig. 16(c) mais de perto, podemos notar que as transições ocorrem em faixas de energia bem definidas, representadas na Fig. 17 em função do raio do

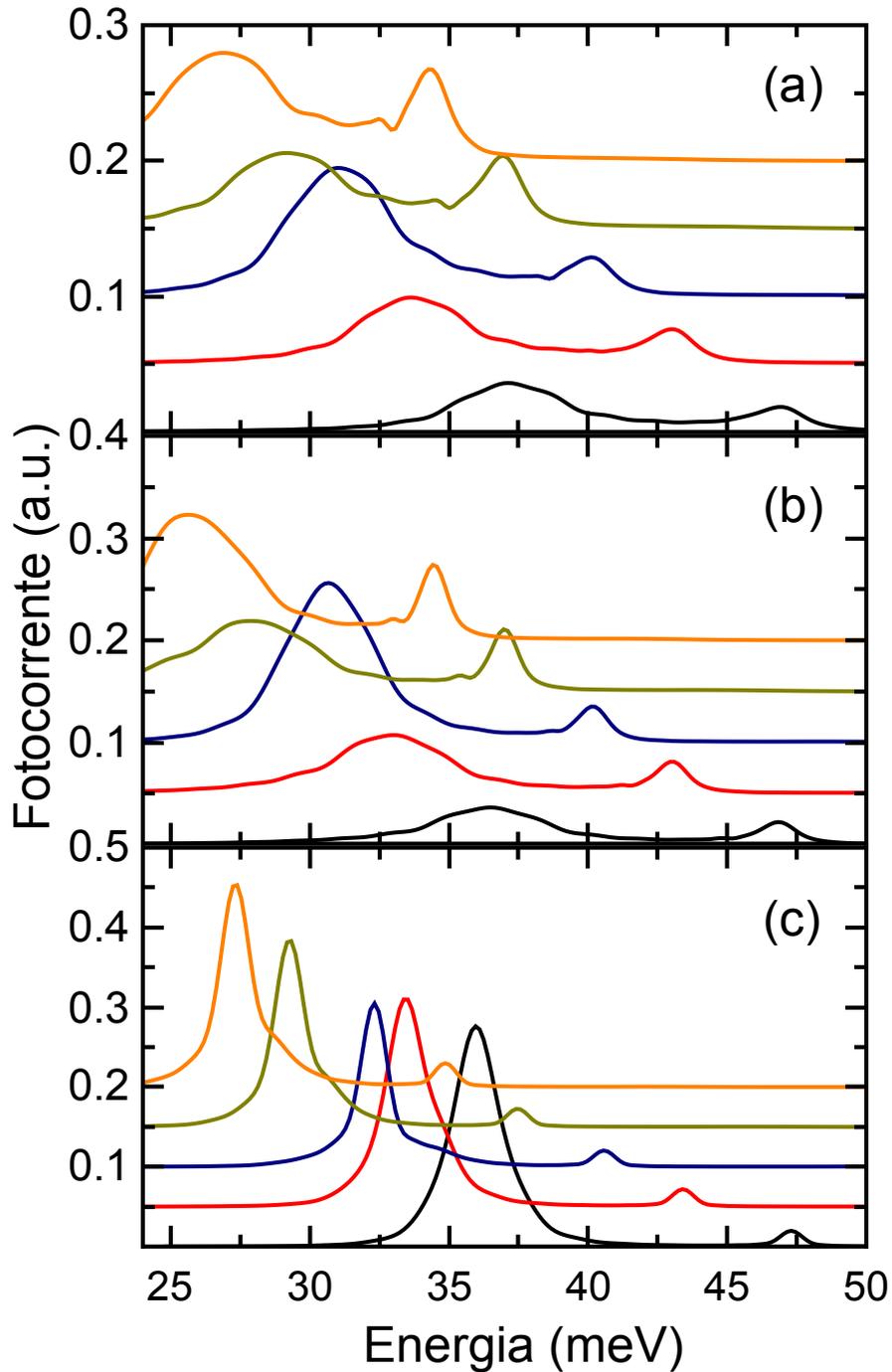


Figura 16: Fotocorrente calculada nos canais em função da energia da luz, $\hbar\omega$, para $E_{dyn} = 5\text{kV/cm}$ para diferentes larguras de canal mais estreito: (a) $d_1 = 100 \text{ \AA}$; (b) $d_1 = 75 \text{ \AA}$; (c) $d_1 = 45 \text{ \AA}$ (nesse caso sem constrição, $d_1 = d_2$). Cada linha representa um raio do ponto diferente: $R = 110 \text{ \AA}$, $R = 115 \text{ \AA}$, $R = 120 \text{ \AA}$, $R = 125 \text{ \AA}$ e $R = 130 \text{ \AA}$, onde a menor fotocorrente no gráfico (preto) corresponde ao $R = 110 \text{ \AA}$, a maior (laranja) representa $R = 130 \text{ \AA}$ e os valores entre correspondem aos demais raios, aumentando seu valor de 5 \AA em 5 \AA . A fotocorrente foi adicionada de 0.1 entre uma e outra curva para melhor visualização.

ponto quântico para $qEd = 5\text{kV/cm}$. À medida que o ponto quântico aumenta de tamanho, a energia necessária para ocorrer o pico diminui, como mostra a linha preta na Fig. 17. As

energias do primeiro pico obedecem à relação $E_{1,Y} - E_0$, onde $E_{1,Y}$ é a energia do primeiro estado excitado e E_0 a energia do estado fundamental do ponto quântico, dando um indício da sua origem. Já o segundo pico obedece à relação $(E_3^D - E_0)/2$ como mostra a linha vermelha, levando à possibilidade de uma transição de dois fótons estar ocorrendo, pois para que a transição aconteça, teria que haver dois fótons cedendo esta quantidade de energia. Logo, uma análise mais detalhada desse pico se faz necessária para identificar suas origens. A Fig. 18 surge, então, como uma forma de identificar o que está acontecendo em cada um dos picos, onde a corrente máxima de cada pico em função de E_{dyn} é ilustrada. Os círculos pretos são resultados numéricos para $d_1 = 45 \text{ \AA}$, já os triângulos vermelhos são para $d_1 = 75 \text{ \AA}$. As linhas cheias do gráfico são funções do tipo $F = \alpha E_{dyn}^2$, e representam os resultados para o primeiro pico, enquanto as pontilhadas são do tipo $F = \beta E_{dyn}^4$, e representam o segundo. O primeiro pico possui uma dependência linear com a intensidade da luz, ou seja, uma dependência quadrática em relação ao campo da luz. Foi utilizado $\alpha = 9 \times 10^{-3}$ para $d_1 = 45 \text{ \AA}$ e $\alpha = 3 \times 10^{-3}$ para $d_1 = 75 \text{ \AA}$. O segundo pico possui uma dependência quadrática em relação à intensidade da luz, *i.e.*, à quarta potência em relação ao campo. Foi utilizado $\beta = 9 \times 10^{-5}$ e $\beta = 3.6 \times 10^{-5}$ para $d_1 = 45 \text{ \AA}$ e $d_1 = 75 \text{ \AA}$, respectivamente. Os resultados foram obtidos utilizando $T_{max} = 3000$ fs. Se aumentássemos o T_{max} , maior seria a probabilidade do portador de sair do ponto, o que alteraria a corrente máxima nos resultados. Porém, os resultados iriam continuar qualitativamente os mesmos, gerando as mesmas conclusões em relação a dependência da intensidade dos picos.

Podemos entender melhor o problema de acordo com a teoria de perturbação de segunda ordem para um campo elétrico oscilante com frequência ω . A taxa de transição do um estado fundamental do poço, $E_0^{(D)}$, para um estado qualquer, $E_n^{(D)}$, cujos autoestados são respectivamente $|0\rangle$ e $|n\rangle$, é

$$R_{0 \rightarrow n}^{(2)} = \frac{2\pi e^4 E_{dyn}^4}{\hbar^4} \left| \sum_m \frac{\langle n|y|m\rangle \langle m|y|0\rangle}{\omega_{m0} - \omega - i\varepsilon} \right|^2 \delta(\omega_{n0} - 2\omega), \quad (3.10)$$

onde $\hbar\omega_{m0} = \hbar\omega_m - \hbar\omega_0 = E_m^{(D)} - E_0^{(D)}$. A dependência com a quarta potência do campo dinâmico, E_{dyn} , na taxa de transição surge naturalmente na teoria pela Eq. (3.10), entrando em concordância também com a Fig. 18, onde o máximo de corrente do segundo pico possui essa dependência, como pode ser visto pelos símbolos abertos nesta figura para $d_1 = 45 \text{ \AA}$ (círculos pretos) e $d_1 = 75 \text{ \AA}$ (triângulos vermelhos).

A função δ de Dirac na Eq. (3.10) sugere que a luz precisa apenas da metade da energia $E_n^{(D)} - E_0^{(D)}$ para que haja transição de segunda ordem do estado $|0\rangle$ para $|n\rangle$, levando à interpretação de uma interação por dois fótons no sistema. Essa análise está de acordo com os resultados da Fig. 16: como foi visto anteriormente, o segundo pico aparece mesmo precisando

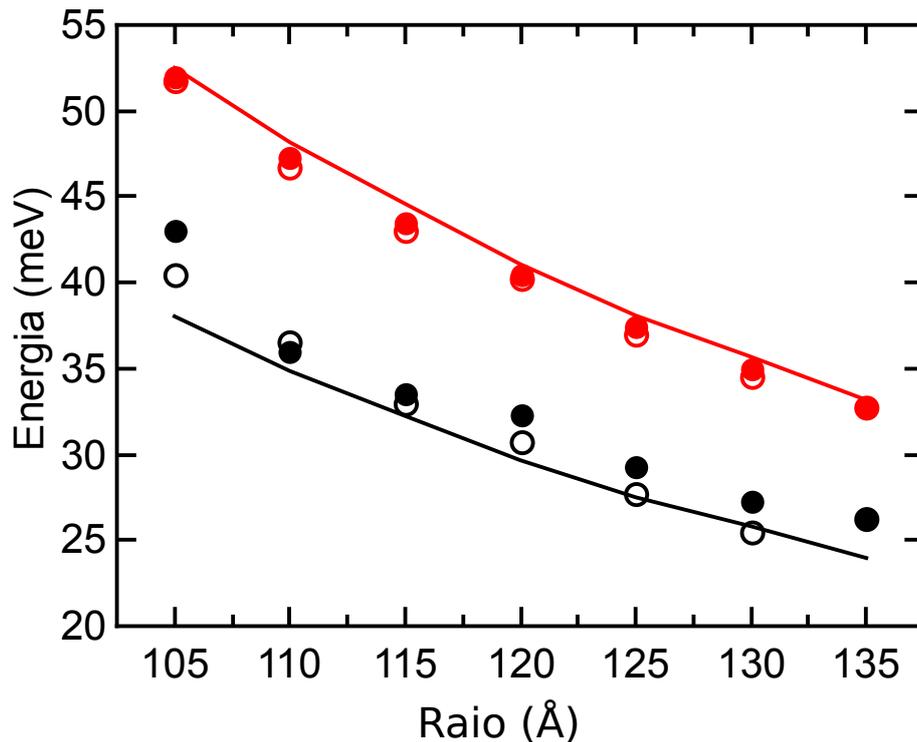


Figura 17: Energia dos picos visto na Fig. 16 em função do raio do ponto R para $E_{dyn} = 5\text{kV/cm}$. Os símbolos cheios (vazios) representam $d_1 = 45(75)$ Å. As linhas são o resultado teórico para a diferença de energia entre o estado fundamental do ponto e estados excitados. A linha preta de menor energia é condizente com uma transição de primeira ordem de E_0 para $E_{1,Y}^{(D)}$, cuja energia é $E_0 - E_1^{(D)}$. A linha vermelha, de maior energia, se assemelha com uma transição de segunda ordem entre E_0 e $E_3^{(D)}$, cuja energia é $(E_0 - E_3^{(D)})/2$.

apenas da metade da energia da transição entre $E_3^{(D)}$ e $E_0^{(D)}$. Surge a necessidade de comprovar a existência de transições virtuais que são válidas a partir da Eq. (3.10) para que a transição de $E_0^{(D)}$ para $E_3^{(D)}$ possa ocorrer.

Vamos considerar, por simplicidade, um ponto quântico isolado de raio $R = 125$ Å, onde o potencial externo é muito alto ($V = \infty$). As energias dos estados $|1S\rangle$, $|1P_{X,Y}\rangle$, $|1D_{X,Y}\rangle$ e $|2S\rangle$ são 18.0meV, 45.5meV, 81.1meV e 94.1meV, respectivamente. Calculando os elementos de matriz de dipolo $\langle n|Y|m\rangle$ entre esses estados, concluímos que a transição do estado fundamental $|1S\rangle$ para o estado $|1P_Y\rangle$ acontece de forma linear em torno de 27meV. Já as transições para os estados $|1D_Y\rangle$ e $|2S\rangle$ acontecem pelo intermédio do estado $|P_Y\rangle$, com energias de segunda ordem por volta de 31.5meV e 38meV, respectivamente. Comparando os resultados com as Fig. 16 e 17, a transição linear para $|1P_Y\rangle$ e a não linear para $|2S\rangle$ podem explicar os picos encontrados. A discrepância dos resultados encontrados é devido ao ponto possuir as aberturas laterais, modificando as energias encontradas. Já a transição de segunda ordem para o estado $|1D_Y\rangle$ é mascarada por seu elemento de matriz ser pequeno e a energia necessária ser similar

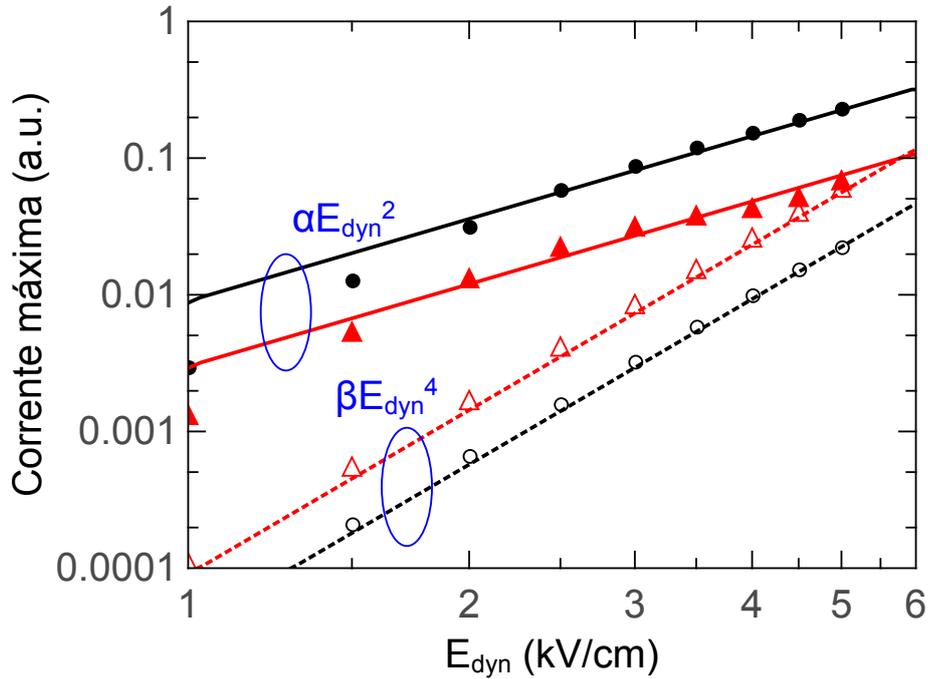


Figura 18: Corrente máxima em função do campo dinâmico da luz, E_{dyn} , para $R = 125 \text{ \AA}$ e duas larguras menores do canal estreito: $d_1 = 45 \text{ \AA}$ (pontos pretos) e 75 \AA (triângulos vermelhos). Símbolos cheios (vazios) representam o pico de menor (maior) energia na Fig. 16, primeiro pico (segundo pico), que concorda com uma função de ordem quadrática (a quarta potência), como pode ser visto pelas linhas contínuas (tracejadas).

à transição linear, que seria por volta de 31meV . Por esse motivo, aparece uma assimetria no primeiro pico da Fig. 16, que representa a junção dessas transições.

Uma maneira de confirmar a presença de transições de ordens maiores é realizar a projeção da função de onda nos estados do ponto isolado, *i.e.*, $\langle \psi | n \rangle$, onde $n = 1S$, $1P_{X,Y}$, $1D_{X,Y}$ ou $2S$. Uma vez que a projeção seja diferente de zero, a existência dessas transições é comprovada. A Fig. 19 mostra um exemplo deste cálculo em função do tempo de simulação para $R = 125 \text{ \AA}$, $d_1 = 45 \text{ \AA}$ e o campo da luz $E_{dyn} = 5\text{kV/cm}$. Neste cálculo, foi utilizado um tempo maior, $T_F = 6000\text{fs}$, comparado aos resultados anteriores, $T_F = 3000\text{fs}$, para melhor visualização das transições entre os estados. As projeções dos estados para o primeiro pico com $\omega = 29.25\text{meV}/\hbar$, é representado na Fig. 19(a), já o segundo pico é representado em (b) com $\omega = 37.25\text{meV}/\hbar$. As projeções que aparecem na Fig. 19(a) não são apenas a transição de primeira ordem $|1S\rangle$ para $|1P_y\rangle$, mas existem projeções não nulas para os estados $|1D_Y\rangle$ e $|2S\rangle$. Assim, a pequena discordância da corrente máxima com αE_{dyn}^2 na Fig. 18 é explicada, já que existem transições de segunda ordem relevantes. As transições na Fig. 19(b) para os estados $|1P_Y\rangle$ e $|1D_Y\rangle$ são pequenas comparadas com a transição de segunda ordem $|1D_Y\rangle$, levando a uma maior concordância com βE_{dyn}^4 na Fig. 18

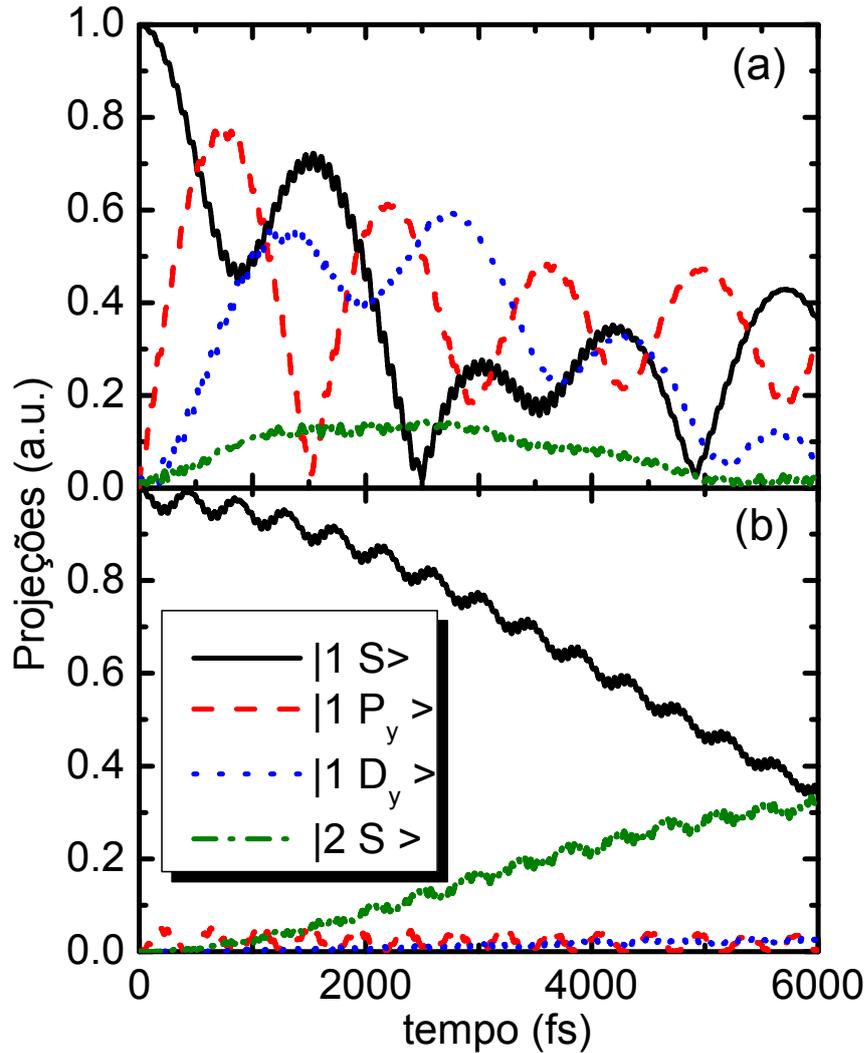


Figura 19: Evolução no tempo das projeções da função de onda propagada sobre os estados do ponto quântico isolado ($|1S\rangle, |1P_y\rangle, |1D_y\rangle$ e $|2S\rangle$), para o raio $R = 125 \text{ \AA}$, $d_1 = 45 \text{ \AA}$, um campo elétrico da luz $E_{dyn} = 5 \text{ kV/cm}$ e frequências: (a) $\omega = 29.25 \text{ meV}/\hbar$, correspondente ao pico de menor energia, primeiro pico, na Fig. 16; (b) $\omega = 37.5 \text{ meV}/\hbar$ pico de maior energia, segundo pico.

Vale ressaltar que, mesmo para transições de segunda ordem, as energias que são observadas estão na faixa de THz, fazendo com que o nosso sistema opere com luz nessa região de frequências.

Uma vez que o sistema é completamente explicado sem a presença de um campo estático externo, podemos analisar agora o que ocorre com a corrente líquida se for aplicado um campo externo $E_{st} \neq 0$. A corrente líquida é dada pela diferença entre as correntes que atravessam os canais da esquerda e da direita na Fig. 14(a). A Fig. 20 representa a corrente máxima líquida em função do campo E_{st} dos picos de frequências diferentes para $R = 125 \text{ \AA}$ e $d_1 = 45 \text{ \AA}$. A Fig. 20(a) representa o pico de frequência maior, já a Fig. 20(b) o de menor. Pode-se observar que quanto mais a intensidade do campo estático aumenta, maior é a corrente líquida do sistema. O aumento é maior também à medida que a luz possui um campo E_{dyn} mais alto,

como pode ser observado na Fig. 20. O campo é aproximadamente linear para o campo de luz menor, tornando-se não linear à medida que o campo da luz aumenta. Podemos notar também que esses efeitos são menores para o pico de maior frequência, Fig. 20(a), comparado ao de frequência menor, Fig. 20(b), onde o aumento da corrente líquida entre $E_{st} = 0$ e $E_{st} = 5\text{kV/cm}$ é bem menor para o primeiro caso.

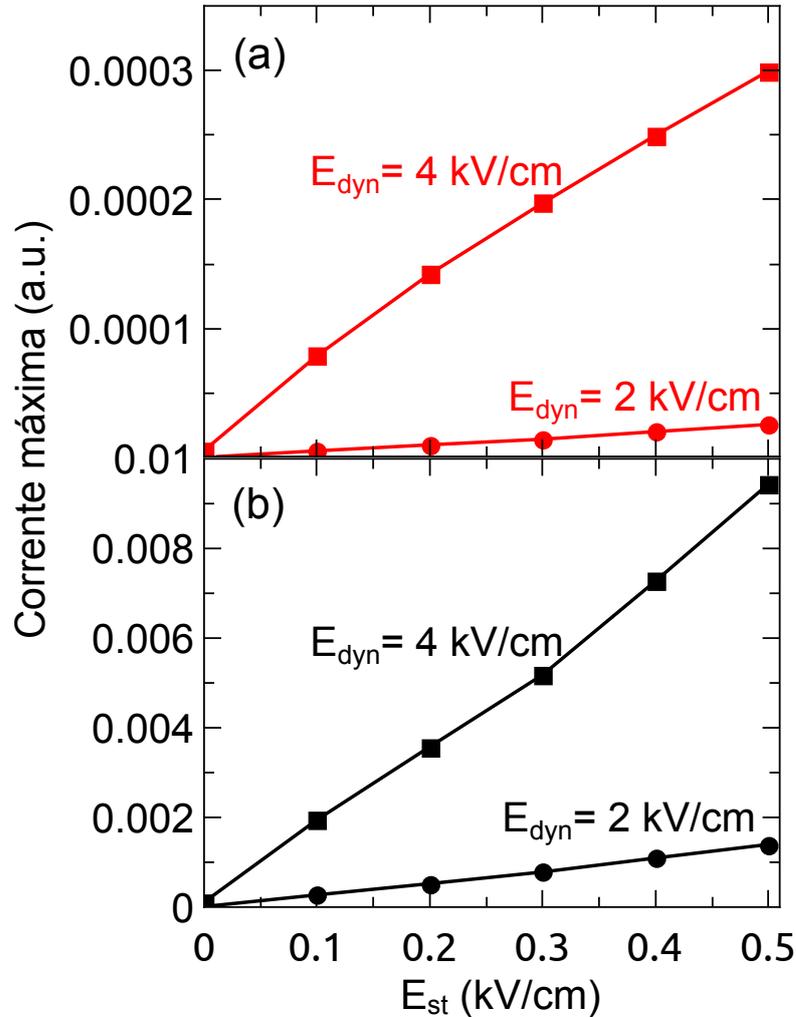


Figura 20: Corrente líquida máxima em função do módulo de um campo elétrico estático, E_{st} para os picos de maior (a) e menor (b) frequência na Fig. 16, com $R = 125 \text{ \AA}$, $d_1 = 45 \text{ \AA}$ e duas intensidades de campo da luz diferentes, $E_{dyn} = 4\text{kV/cm}$ (quadrados) e $E_{dyn} = 2\text{kV/cm}$ (círculos).

4 CONCLUSÃO

Neste trabalho, utilizamos o método *split-operator* para investigar propriedades de transporte e eletrônicas em um fotodetector de ponto quântico. O sistema estudado é formado por canais laterais que se estreitam e se conectam a um círculo. Uma maneira de se fazer esse sistema é através de métodos de crescimento epitaxial, onde a estrutura descrita pode ser formada depositando um material semiconductor A no formato proposto sobre um substrato formado por outro material semiconductor B, e posteriormente cobrindo todo o sistema com o material do substrato B, de forma que a estrutura depositada fique intercalada pelo material do substrato. Alternativamente, o sistema pode ser fabricado por litografia em um material semiconductor 2D.

O sistema proposto consiste em um exemplo de estrutura onde o elétron está confinado apenas por um efeito puramente quântico: uma partícula em um sistema clássico com a mesma geometria estaria livre, como discutido no Capítulo 1.5.

Observamos que ao fazer um fóton interagir com o elétron do sistema, uma corrente líquida de densidade de probabilidade (proporcional à fotocorrente) é encontrada para determinadas faixas de frequência do fóton incidente. Isso ocorre porque, ao interagir com um portador de carga, o fóton transmite energia suficiente para que o portador possa passar para um estado onde possa ocorrer a emissão de uma fotocorrente. Observamos a existência de dois picos de fotocorrente no dispositivo, cujas frequências dependem de parâmetros do sistema, tais quais a largura dos poços e o raio do ponto quântico. O pico de frequência mais baixa ocorre devido à transição de primeira ordem entre o estado fundamental e o segundo estado excitado do ponto quântico. A dependência da intensidade da corrente para o pico de frequência menor é proporcional ao quadrado do campo elétrico da luz, justificando a transição de primeira ordem mencionada anteriormente. Já o de frequência maior ocorre devido a transições de segunda ordem, através de estados excitados intermediários, que podem ser explicadas a partir da teoria de perturbação de segunda ordem dependente do tempo. De fato, verificamos a dependência de quarta ordem da fotocorrente em função do campo elétrico da luz. Outra maneira de afirmar que a transição é de segunda ordem é calcular a função de onda propagada no tempo sobre as projeções dos auto estados do ponto. Nossos resultados mostram quatro auto estados pelos quais o elétron passa antes de contribuir para fotocorrente.

O estudo realizado nesta tese, por simplicidade, é feito sem levar em consideração efeitos devido à temperatura, interação elétron-elétron, desordem e outros mecanismos que levam em conta efeitos de espalhamento. As frequências capazes de serem detectadas vão depender dos materiais dos quais o dispositivo é feito, mas nossos resultados mostram picos de

fotocorrente claros em frequências na faixa do Terahertz, frequência que tem atraído bastante interesse nos últimos anos para possível aplicação em futuros dispositivos optoeletrônicos.

Comparado ao sistema equivalente proposto em [29] no qual este trabalho é inspirado, a diferença principal está na origem do potencial de confinamento: uma vez que as barreiras de potencial em [29] provém de *band offsets* entre materiais, as energias envolvidas acabam sendo da ordem de centenas de meV. Já no caso do sistema proposto aqui, os potenciais de confinamento são bem menores e ajustáveis pela largura dos poços e raio do ponto, originando picos de fotocorrente para frequências em THz.

Como perspectivas para este trabalho, podemos utilizar outros materiais semicondutores para sua fabricação ou mudar a geometria do dispositivo. Além disso, podemos investigar a possibilidade de se obter um ajuste fino das energias de fotocorrente através de agentes externos, como por exemplo, um campo magnético aplicado. Além de influenciar as energias do ponto através de desvios diamagnéticos, este campo quebraria a degenerescência dos estados P do ponto. O efeito disso sobre as transições virtuais em fotocorrentes originadas em efeitos não lineares, discutidas anteriormente, é algo a ser investigado neste caso. Além disso, podemos usar os métodos matemáticos desenvolvidos aqui para simular fotocorrentes geradas por luz pulsada neste sistema.

REFERÊNCIAS

- [1] W. Herschel. “XIV. Experiments on the refrangibility of the invisible rays of the sun”. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London*, v. 90, p. 284-292, (1800).
- [2] R. A. de Oliveira, A. P. B. da Silva. “William Herschel, os raios invisíveis e as primeiras ideias sobre radiação infravermelha”. *Revista Brasileira de Ensino de Física*, v. 36, n. 4, p. 01-11, (2014).
- [3] F. M. Fernandes. “Fotodetectores infravermelhos de alta eficiência baseados em poços quânticos crescidos por epitaxia de feixes moleculares”. Tese de Doutorado, Universidade de São Paulo, (2013).
- [4] D. N. Micha, G. M. Penello, R. M. S. Kawabata, T. Camarotti, G. Torelly, P. L. de Souza. “Enxergando no escuro: a física do invisível”, *Física na Escola* 12 (2011).
- [5] M. S. Claro. “Novas tecnologias para detecção infravermelha de alto desempenho”. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo, (2017).
- [6] A. D. B. Maia. “Crescimento, fabricação e teste de fotodetectores de radiação infravermelha baseados em pontos quânticos”, Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo, (2012).
- [7] M. Long, P. Wang, H. Fang, H., W. Hu. “Progress, challenges, and opportunities for 2D material based photodetectors”. *Advanced Functional Materials*, v. 29, n. 19, p. 1803807, (2019).
- [8] A. Chaves. “Dinâmica de pacotes de onda em semicondutores e grafeno e de vórtices em supercondutores”. Programa de Pós-graduação do Departamento de Física da UFC, (2010).
- [9] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin. “Física do estado sólido”. Cengage learning. (2011).
- [10] H. Haug, S. W. Koch. “Quantum theory of the optical and electronic properties of semiconductors”. World Scientific Publishing Company. (2009).
- [11] G. O. de Sousa. “Anéis e pontos quânticos de fósforo negro investigados pelo modelo contínuo”. Dissertação de Mestrado. UFC, (2016).
- [12] C. L. N. D. Oliveira. “Excitons em sistemas quânticos 0-2D”. Dissertação de Mestrado. UFC, (2005).
- [13] A. A. de Sousa. “Vazamentos de correntes e ineficiência de corrente de transporte em nanoestruturas semicondutoras investigadas através de propagação de pacotes de onda: proefschrift”. Tese de Doutorado, (2015).
- [14] V. F. Silva. “Efeitos coerentes em pontos quânticos semicondutores”. Tese de Doutorado (2019).
- [15] G. Schedelbeck, W. Wegscheider, M. Bichler, G. Abstreiter. “Coupled quantum dots fabricated by cleaved edge overgrowth: From artificial atoms to molecules”. *Science* 278 (1997) 1792.

- [16] P. Guyot-Sionnest. "Colloidal quantum dots". *C R Phys* 9 (2008) 777.
- [17] C. G. Pankiewicz. "Localização de pontos quânticos semicondutores via nanolitografia por oxidação anódica". Universidade Federal de Minas Gerais, Belo Horizonte, Brasil (2009).
- [18] Y. Shirasaki, G. J. Supran, M. G. Bawendi, V. Bulović. "Emergence of colloidal quantum-dot light-emitting technologies". *Nat. Photonics* 7 (2013) 13.
- [19] L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, S. Tarucha. "Few-electron quantum dots". *Rep. Prog. Phys* 64 (2001) 701.
- [20] I. R. Pagnossin. "Propriedades de transporte elétrico de gases bidimensionais de elétrons nas proximidades de pontos-quânticos de InAs". Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo, (2004).
- [21] H. Elayan, O. Amin, B. Shihada, R. M. Shubair, M. S. Alouini. "Terahertz band: The last piece of RF spectrum puzzle for communication systems". *IEEE Commun Mag* 1 (2019) 1.
- [22] C, M, Nascimento. "Análise de estruturas planares em THz baseadas em grafeno". Tese de Doutorado. UFPA, (2016).
- [23] J. Federici, L. Moeller. "Review of terahertz and subterahertz wireless communications". *J. Appl. Phys.* 107, 11 (2010) 6.
- [24] R. Piesiewicz, J. Jemai, M. Koch, T. Kurner. "THz channel characterization for future wireless gigabit indoor communication systems. In: Terahertz and Gigahertz Electronics and Photonics IV". *Proc. SPIE* 5727 (2005) 166.
- [25] A. Hirata, T. Nagatsuma, T. Kosugi, H. Takahashi, R. Yamaguchi, N. Shimizu, N. Kukutsu, K. Murata, Y. Kado, H. Ikegawa, H. Nishikawa, T. Nakayama. "10-Gbit/s wireless communications technology using sub-terahertz waves". *Proc. SPIE* 6772 (2007) 67720B.
- [26] L. B. Paiva. "Aplicação da espectroscopia fotoacústica para a detecção das moléculas gasosas etileno, óxido nítrico, amônia e dióxido de carbono em sistemas artificiais e biológicos". Tese de Doutorado. Universidade Estadual do Norte Fluminense (2012).
- [27] J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco, C. Sirtori, A. L. Hutchinson, A. Y. Cho. "Quantum cascade laser". *Science* 264 (1994) 553.
- [28] C. Gmachl, F. Capasso, D. L. Sivco, A. Y. Cho. "Recent progress in quantum cascade lasers and applications". *Rep. Prog. Phys* 64 (2001) 1533.
- [29] M. H. Degani, M. Z. Maialle, P. F. Farinas, N. Studart. "Infrared photocurrent with one-and two-photon absorptions in a double-barrier quantum well system". *J. Appl. Phys.* 110 (2011) 104313.
- [30] H. Moon, C. Lee, W. Lee, J. Kim, H. Chae. "Stability of quantum dots, quantum dot films, and quantum dot light-emitting diodes for display applications". *Adv. Mater.* 31 (2019) 1804294.
- [31] D. Piester, P. Bonsch, T. Schrimpf, H. H. Wehmann, A. Schlachetzki. "Laser-action in V-groove-shaped InGaAs-InP single quantum wires". *IEEE J. Sel. Top. Quantum Electron.* 6 (2000) 522.

- [32] X. Q. Shen, M. Tanaka, K. Wada, T. Nishinaga. “Molecular beam epitaxial growth of GaAs, AlAs and Al_{0.45}Ga_{0.55}As on (111) A-(001) V-grooved substrates”. *J. Cryst. Growth.* 135 (1994) 85.
- [33] A. Chaves, G. A. Farias, F. M. Peeters, B. Szafran. “Wave packet dynamics in semiconductor quantum rings of finite width”. *Phys. Rev. B* 80 (2009) 125331.
- [34] Y. C. Chang, L. L. Chang, L. Esaki. “A new one-dimensional quantum well structure”. *Appl. Phys. Lett.* 47 (1985) 1324.
- [35] S. Chen, M. Yoshita, A. Ishikawa, T. Mochizuki, S. Maruyama, H. Akiyama, Y. Hayamizu, L. N. Pfeiffer, K. W. West. “Intrinsic radiative lifetime derived via absorption cross section of one-dimensional excitons”. *Sci. Rep.* 3 (2013) 1.
- [36] F. F. Batista Jr, A. Chaves, D. R. da Costa, G. A. Farias. “Curvature effects on the electronic and transport properties of semiconductor films”. *Physica E Low Dimens. Syst. Nanostruct.* 99 (2018) 304.
- [37] R. C. T. da Costa. “Quantum mechanics of a constrained particle”. *Phys. Rev. A* 23 (1981) 1982.
- [38] A. CHAVES, G. A. Farias, F. M. Peeters, R. Ferreira. “The Split-Operator Technique for the Study of Spinorial Wavepacket Dynamics”. *Commun. Comput. Phys* 17 (2015) 850.
- [39] H. Tal-Ezer, R. Kosloff. “An accurate and efficient scheme for propagating the time dependent Schrödinger equation”. *J. Chem. Phys.* 81 (1984) 3967.
- [40] H. Fehske, J. Schleede, G. Schubert, G. Wellein, V. S. Filinov, A. R. Bishop. “Numerical approaches to time evolution of complex quantum systems”. *Phys. Lett. A* 373 (2009) 2182.
- [41] J. P. M. Braga. “Técnica Split Operator em Coordenadas Generalizadas”. Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-graduação do Departamento de Física da UFC (2010).
- [42] M. H. Degani, M. Z. Maialle. “Numerical calculations of the quantum states in semiconductor nanostructures”. *J. Comput. Theor. Nanosci.* 7 (2010) 454.
- [43] S. Yuan, H. de Raedt, M. I. Katsnelson. “Modeling electronic structure and transport properties of graphene with resonant scattering centers”. *Phys. Rev. B* 82 (2010) 115448.
- [44] A. Weiße, G. Wellein, A. Alvermann, H. Fehske. “The kernel polynomial method”. *Rev. Mod. Phys.* 78 (2006) 275.
- [45] N. Watanabe, M. Tsukada. “Fast and stable method for simulating quantum electron dynamics”. *Phys. Rev. E* 62 (2000) 2914.
- [46] M. Suzuki. “Fractal decomposition of exponential operators with applications to many-body theories and Monte Carlo simulations”. *Phys. Lett. A* 146 (1990) 319.
- [47] J. A. A. Manco. “Condições de contorno não reflexivas para simulação numérica de alta ordem de instabilidade de Kelvin-Helmholtz em escoamento compressível”. Tese de Doutorado, INPE (2014).
- [48] R. Kosloff, D. Kosloff. “Absorbing Boundaries for Wave Propagation Problems”, *J. Comput. Phys.* 63 (1986) 363.

- [49] D. Neuhauser, M. Baer. “The timedependent Schrödinger equation: Application of absorbing boundary conditions” *J. Chem. Phys.* 90 (1988) 4351.
- [50] A. Arnold, M. Ehrhardt, I. Sofronov. “Discrete transparent boundary conditions for the Schrödinger equation: Fast calculation, approximation, and stability”. *Commun. Math. Sci.* 1 (2003) 501.
- [51] D. E. Manolopoulos. “Derivation and reflection properties of a transmission-free absorbing potential”. *J. Chem. Phys.* 117 (2002) 9552.
- [52] C. W. Groth, M. Wimmer, A. R. Akhmerov, X. Waintal. “Kwant: a software package for quantum transport”. *New J. Phys.* 16 (2014) 063065.

APÊNDICE A – DEMONSTRAÇÕES MATEMÁTICAS

- Queremos demonstrar que

$$\exp[\varepsilon(A_1 + A_2)] = \exp\left[\frac{\varepsilon}{2}A_1\right] \exp[\varepsilon A_2] \exp\left[\frac{\varepsilon}{2}A_1\right] + E(\varepsilon^3), \quad (\text{A.1})$$

onde A_1 e A_2 são operadores que não comutam entre si, ou seja $[A_1, A_2] \neq 0$, ε uma constante e $E(\varepsilon^3)$ um erro. Para demonstrar a Eq. (A.1), iremos utilizar a definição de exponencial de um operador e comparar os dois lados da equação. A exponencial de um operador A é

$$\exp[A] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{A^n}{n!}. \quad (\text{A.2})$$

Utilizando a Eq. (A.2) para o lado esquerdo da Eq. (A.1), temos

$$\exp[\varepsilon(A_1 + A_2)] = 1 + \varepsilon(A_1 + A_2) + \frac{1}{2}\varepsilon^2(A_1 + A_2)^2 + \frac{1}{3!}\varepsilon^3(A_1 + A_2)^3 + \dots, \quad (\text{A.3})$$

$$= 1 + \varepsilon A_1 + \varepsilon A_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_1^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_2^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_2A_1 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_1A_2 + \frac{1}{3!}\varepsilon^3(A_1 + A_2)^3 \dots, \quad (\text{A.4})$$

$$= 1 + \varepsilon A_1 + \varepsilon A_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_1^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_2^2 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_2A_1 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_1A_2 + E(\varepsilon^3), \quad (\text{A.5})$$

onde

$$E(\varepsilon^3) = \frac{1}{3!}\varepsilon^3(A_1 + A_2)^3 \dots \quad (\text{A.6})$$

Iremos agora expandir o lado direito da Eq. (A.1):

$$\begin{aligned} \exp\left[\frac{\varepsilon}{2}A_1\right] \exp[\varepsilon A_2] \exp\left[\frac{\varepsilon}{2}A_1\right] &= \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}A_1 + \frac{\varepsilon^2}{8}A_1^2 + E(\varepsilon^3)\right) \\ &\times \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}A_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_2^2 + E(\varepsilon^3)\right) \left(1 + \frac{\varepsilon}{2}A_1 + \frac{\varepsilon^2}{8}A_1^2 + E(\varepsilon^3)\right). \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Efetuada a multiplicação e agrupando os termos, encontramos

$$\exp\left[\frac{\varepsilon}{2}A_1\right] \exp[\varepsilon A_2] \exp\left[\frac{\varepsilon}{2}A_1\right] = 1 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_2A_1 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_2^2 + \varepsilon A_1 + \varepsilon A_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_1A_2 + \frac{\varepsilon^2}{2}A_1^2 + E(\varepsilon^3). \quad (\text{A.8})$$

Comparando a Eq. (A.5) e Eq. (A.8), vemos que elas são iguais, logo

$$\exp[\varepsilon(A_1 + A_2)] = \exp\left[\frac{\varepsilon}{2}A_1\right] \exp[\varepsilon A_2] \exp\left[\frac{\varepsilon}{2}A_1\right] + E(\varepsilon^3). \quad (\text{A.9})$$

- Iremos demonstrar a seguinte relação:

$$\exp(\varepsilon a) = \left[1 - \frac{\varepsilon A}{2}\right]^{-1} \left[1 - \frac{\varepsilon A}{2}\right]. \quad (\text{A.10})$$

O operador unitário I pode ser escrito como o produto de um operador pela da inversa do mesmo, isto é, para o operador A , temos

$$I = AA^{-1}. \quad (\text{A.11})$$

Fazendo

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

podemos escrever,

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

$$\exp(\varepsilon A) = \exp\left[-\frac{\varepsilon A}{2}\right] \exp\left[\frac{\varepsilon A}{2}\right]. \quad (\text{A.14})$$

Utilizando a Eq. (A.2), temos para a Eq. (A.14)

$$\exp(\varepsilon A) = \left[1 - \frac{\varepsilon}{2} + E(\varepsilon^2)\right]^{-1} \left[1 - \frac{\varepsilon}{2} + E(\varepsilon^2)\right]. \quad (\text{A.15})$$

Logo, de maneira aproximada concluímos

$$\exp(\varepsilon A) = \left[1 - \frac{\varepsilon}{2}\right]^{-1} \left[1 - \frac{\varepsilon}{2}\right]. \quad (\text{A.16})$$

- Queremos demonstrar as seguintes relações

$$a) \quad \frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + E(\Delta x^2), \quad (\text{A.17})$$

e

$$b) \quad \frac{d^2 f(x)}{dx^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + E(\Delta x^2). \quad (\text{A.18})$$

Primeiramente vamos demonstrar a parte *a*). Expandindo a função $f(x + \Delta x)$ em série de Taylor, encontramos em torno do ponto x

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

Podemos permutar Δx por $-\Delta x$ na Eq. (A.19),

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

Subtraindo a Eq. (A.20) da Eq. (A.19) e isolando a derivada em x , temos

$$f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x) = 2\frac{df(x)}{dx}\Delta x + \frac{2}{3!}\frac{d^3f(x)}{dx^3}\Delta x^3 + \dots, \quad (\text{A.21})$$

$$\frac{df(x)}{dx} = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2\Delta x} + E(\Delta x^2), \quad (\text{A.22})$$

onde $E(\Delta x^2)$ representa o erro dado por

$$E(\Delta x^2) = \frac{1}{3!}\frac{d^3f(x)}{dx^3}\Delta x^2 + \dots \quad (\text{A.23})$$

Para demonstrar a parte *b*), somamos as Eq. (A.19) e Eq. (A.20) e isolando o termo correspondente à derivada segunda,

$$f(x + \Delta x) + f(x - \Delta x) = 2f(x) + \frac{d^2}{dx^2}f(x)\Delta x^2 + \frac{2}{4!}\frac{d^4}{dx^4}f(x)\Delta x^4 \dots, \quad (\text{A.24})$$

$$\frac{d^2f(x)}{dx^2} = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{\Delta x^2} + E(\Delta x^2), \quad (\text{A.25})$$

onde $E(\Delta x^2)$ representa o erro dado por

$$E(\Delta x^2) = \frac{2}{4!}\frac{d^4}{dx^4}f(x)\Delta x^2 \dots \quad (\text{A.26})$$

APÊNDICE B – ARTIGO PUBLICADO RELACIONADO À TESE

Journal of
Applied Physics

ARTICLE

scitation.org/journal/jap

Terahertz photo-generated current in a two-dimensional quantum dot system

Cite as: *J. Appl. Phys.* **128**, 185702 (2020); doi: 10.1063/5.0025181

Submitted: 13 August 2020 · Accepted: 26 October 2020 ·

Published Online: 11 November 2020



R. Rodrigues Oliveira,^{1,a)} D. R. da Costa,^{1,2} G. A. Farias,¹ R. Ferreira,³ and A. Chaves^{1,b)}

AFFILIATIONS

¹Departamento de Física, Universidade Federal do Ceará, Caixa Postal 6030, 60455-760 Fortaleza, Ceará, Brazil

²Department of Electrical and Computer Engineering, University of Minnesota, 200 Union Street SE, 4-174 Keller Hall, Minneapolis, Minnesota 55455-0170, USA

³Laboratoire de Physique de l'Ecole Normale Supérieure, ENS, Université PSL, CNRS, Sorbonne Université, Université de Paris, 75005 Paris, France

^{a)}Electronic mail: ravenna.rodrigues@fisica.ufc.br

^{b)}Author to whom correspondence should be addressed: andrey@fisica.ufc.br

ABSTRACT

The photo-generated current due to electronic transitions in a semiconductor planar quantum dot attached to outgoing leads is theoretically investigated. An electron is confined in the dot by a pure quantum mechanical effect, which is due to the higher ground state energy of the quantum wells forming the leads, as compared to the one in the dot. The dynamics of such a confined electron interacting with a light pulse is investigated by numerically solving a time-dependent Schrödinger equation within the effective mass approximation and goes beyond the lowest order perturbative approach. Our results show the coexistence of both linear and non-linear contributions to the photo-generated current in this system, sharply peaked at frequencies in the terahertz range, which are further tunable by the quantum dot radius. The peaks can be made even sharper as one adds a narrow constriction in the dot-leads connection. The details of the dependence of the peaks' frequency, intensity, and sharpness on system parameters are discussed.

Published under license by AIP Publishing. <https://doi.org/10.1063/5.0025181>

I. INTRODUCTION

Photodetectors are an important component of current electronics and are used in several fields such as telecommunications, astronomy, imaging devices, laser ranging, remote sensing, and others.^{1,2} Over the past few years, many photodetecting devices were developed, mostly based on semiconductor heterostructures.^{3,4} Many of these devices operate in infrared or mid-infrared frequencies,^{5,6} while photodetection in the terahertz (THz) frequency domain is still proven to be challenging. The pursuit for novel technological applications in THz has attracted increasing interest for many reasons, including its higher bandwidth, as compared to millimeter wave or microwave systems, and the fact that this frequency range has less interaction with the environment, since there is typically less ambient THz light noise as compared to infrared light noise.⁷ Infrared frequency is heavily employed in wireless devices, and as the number of devices grows, saturation in the advances on infrared based communications is highly anticipated, which has been

stimulating the development of novel technologies that go beyond this frequency range.⁷⁻⁹

An interesting example of an infrared photodetector was proposed in Ref. 6, where a semiconductor heterostructure forms a quantum well, defined in between two narrow and higher energy barriers, followed by longer lower energy barriers. This can be achieved by assuming, e.g., an alloy $\text{Ga}_x\text{Al}_{(1-x)}\text{As}$ as barrier and AlAs as a quantum well, so that a higher concentration x within finite regions near the AlAs well would provide the higher energy finite barriers. The quantum confinement potential is, thus, formed by the conduction band mismatch between the materials. For a confined electron in the ground state of the quantum well, in the absence of narrow barriers, any light frequency with energy higher than the difference between the barrier energy and the ground state energy would lead to a photo-generated current. However, in the presence of narrow higher energy barriers, a much better control of the photo-current is demonstrated: the current is peaked only at