

UNICAMP

Simulação de Estados Quânticos

Ruffo¹, C. V. R. S.; Degani, M. H. Faculdade de Ciências Aplicadas - FCA UNICAMP, Limeira - SP, Brasil

¹claudioviniciusr@gmail.com

Palavras-chave: Schrödinger – Poço quântico - Elétron



Introdução

Com o avanço das técnicas experimentais de crescimento de cristais como MBE, novas estruturas constituídas de semicondutores têm sido realizadas. Sistemas como poços quânticos, fios e pontos quânticos de alta qualidade são criados e apresentam várias propriedades interessantes, muitas delas com aplicações práticas. Para entendermos as propriedades eletrônicas destas estruturas, governados pela mecânica quântica, precisamos calcular seus estados resolvendo a equação de Schrödinger. Neste trabalho utilizamos um método numérico para



Metodologia

- Uso do método numérico conhecido como Split- Operator
- Vantagens: pode-se obter a evolução temporal dos estados assim como calcular os auto-estados do sistema através da propagação no domínio dos tempos imaginário.

Partindo de um estado inicial, a função de onda evolui da seguinte forma: $\Psi(\mathbf{r}, \Delta t) = e^{-\frac{iH\Delta t}{\hbar}} \Psi(\mathbf{r}, 0)$

Aproximação:

$$e^{-\frac{i\mathbf{H}\Delta t}{\hbar}} = e^{-\frac{i(\mathbf{T}+\mathbf{V})\Delta t}{\hbar}} = e^{-\frac{i\mathbf{V}\Delta t}{2\hbar}} e^{-\frac{i\mathbf{p}^{2}\Delta t}{2m\hbar}} e^{-\frac{i\mathbf{V}\Delta t}{2\hbar}} + O(\Delta t^{3})$$
$$\Psi(x,\Delta t) \cong e^{-\frac{i\mathbf{V}\Delta t}{2\hbar}} e^{-\frac{i\mathbf{p}^{2}\Delta t}{2m\hbar}} e^{-\frac{i\mathbf{V}\Delta t}{2\hbar}} \Psi(x,0)$$

Obtenção do estado fundamental através da propagação no domínio de tempo imaginário, t=-íx, os estados excitados são obtidos impondo orto-normalidade entre os estados.

Estudamos o efeito de um campo elétrico estático e oscilante:

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(z) + ezF_{st} + ezF_0sen\omega t$$

Resultados

Calculamos a transmissão eletrônica através de vários potenciais.
 O estudo foi realizado para sistemas a partir de combinações entre poços e barreiras de Ga_{1-x}Al_xAs, variou-se a concentração x do alumínio, a distância e largura entre barreiras.

[®] Escolhemos uma estrutura com dupla barreira para calcular a fotocorrente em função da freqüência ω do campo elétrico. Mostramos a existência de dois picos principais, um deles com intensidade proporcional a ~F₀² e o outro, para campos acima de 10 kV/cm ~ F₀^{3.5},

Conclusões

Os resultados obtidos com a presença de um campo oscilante mostraram que há na fotocorrente, um pico em 124 meV e outro em 154 meV

Origem do pico em 154 meV: transição do estado fundamental (-112,4meV) para o primeiro pico ressonante (40,5 meV)

Origem do pico em 124 meV: transição do estado fundamental (-112,4 meV) para o segundo pico ressonante (134,6 meV) envolvendo a absorção de dois fótons de123,5 meV.

[®] Pico de 124 meV tem dependência proporcional a ${}^{\sim}F_0{}^2$ para campos até 10 kV/ cm. Para campos mais fortes a dependência é proporcional a $F_0{}^{3.5}$ dependência não linear com a potência, característica de fenômenos envolvendo absorção de mais de um fóton.

demonstrando os efeitos não lineares.

