

Fourier Grid Hamiltonian aplicado ao estudo das propriedades ópticas e de transporte de células solares de banda intermediária simuladas computacionalmente usando a linguagem Julia



Almeida*, J.V., Silva, Y. L. B., Macedo, G. S., Bezerra, A. T.

Introdução

A maturidade tecnológica proveniente de estudos específicos na área de dispositivos semicondutores optoeletrônicos tem aumentado significativamente nas últimas décadas. Dentre estes avanços podemos evidenciar a utilização da energia limpa e renovável por meio de células solares, que podem ser otimizadas em células solares de banda intermediária, que apresentam maior eficiência que as células solares padrão.

Para a análise quântica das propriedades óticas e de transporte eletrônico, construímos um algoritmo numérico resolvendo a equação de Schroedinger utilizando o método *Fourier Grid Hamiltonian* por meio da linguagem de alto padrão *Julia*.

Método

O método consiste em escrever os operadores nas bases em que são autovetores e diagonalizar a matriz resultante do Hamiltoniano para obtenção das autoenergias e dos autovetores do sistema.

Equação de Schroedinger Independente do Tempo

$$\hat{H} = \hat{T} + V(\hat{x}) = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$$

Equação de Schrödinger independente do tempo nas bases em que são autovetores

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

Implementação numérica

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

Diagonalização do operador Hamiltoniano

$$\det \left[H_{IJ} - \frac{E_n \delta_{ij}}{\Delta x} \right] = 0$$

Resultados

Feito a construção do Hamiltoniano, o mesmo é diagonalizado devolvendo os autovetores e autoenergias. Com esses valores podemos analisar os estados energéticos ligados e não ligados ao poço de potencial. A figura 1 representa três estados energéticos ligados.

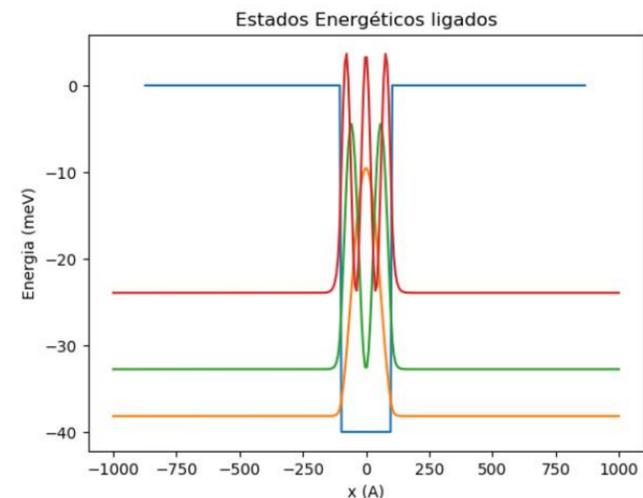


Figura 1: Três estados energéticos ligados ao poço de potencial.

Explicitando as taxas em que os portadores de cargas são transicionados entre os subníveis energéticos, calculamos a regra de ouro de Fermi.

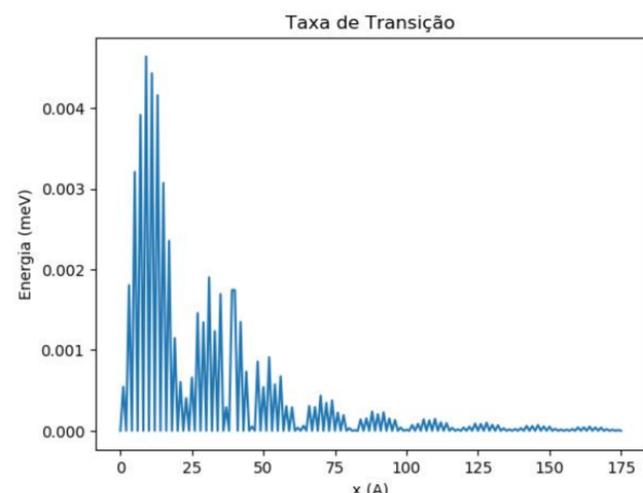


Figura 2: Taxa de transição pela regra de ouro de Fermi.

Conclusão

Com base nos resultados obtidos a partir das análises óticas e de transporte, é possível com este trabalho complementar a gama de ferramentas necessárias para o aperfeiçoamento de células solares de banda intermediária.

Referências

- [1] Luque A, Martí A, 1997. Increasing the Efficiency of Ideal Solar Cells by Photon Induced Transitions at Intermediate Levels, *Phys. Rev. Lett.*, vol. 78: 5014–5017.
- [2] A. Luque, A. Mart, and C. Stanley, “Understanding intermediate-band solar cells”, *Nature Photonics*, vol. 6, no. 3, pp. nphoton - 2012, 2012.
- [3] Massachusetts Institute of Technology, “The Julia Language.” Disponível em: “<https://julialang.org/>”.

Agradecimentos

