

João Victor de Almeida

**ANÁLISE DE CÉLULAS SOLARES DE BANDA
INTERMEDIÁRIA A PARTIR DO MÉTODO
FOURIER GRID HAMILTONIAN**

Brasil

2019

João Victor de Almeida

**ANÁLISE DE CÉLULAS SOLARES DE BANDA
INTERMEDIÁRIA A PARTIR DO MÉTODO FOURIER
GRID HAMILTONIAN**

Trabalho de conclusão de curso apresentado
como requisito para aprovação na disciplina
TCC 2 do curso de Física Licenciatura da
Universidade Federal de Alfenas. Área de
concentração: física de estado sólido.

Universidade Federal de Alfenas - UNIFAL-MG

Trabalho de Conclusão de Curso

Orientador: Prof. Dr. Anibal Thiago Bezerra

Brasil
2019

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à minha família, em específico minha mãe, Adriana de Cássia Almeida, minha vó, Lenice Pereira Lopes e meu irmão Pedro Henrique de Almeida, pelo auxílio e apoio dado durante toda a graduação.

Agradeço também os meus amigos, em especial Cleytom Evander e Ricardo Emídio pelos tempos de descontração, pelo suporte e apoio durante maior parte da minha graduação.

Agradeço também ao meu orientador Anibal, que ao longo de todo o curso me auxiliou a adquirir maturidade durante meu desenvolvimento acadêmico, sendo responsável, junto aos demais professores, por me fazer enxergar e explicar o mundo com base na ciência.

Por fim agradeço a Unifal, o Departamento de Física pela oportunidade e suporte durante minha graduação e órgão financiador FAPEMIG, por ter possibilitado a execução do projeto.

“Viver só vale a pena se pudermos contribuir de alguma maneira para essa interminável cadeia de progresso.”

— Paul A.M. Dirac

Resumo

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. Contudo, a busca crescente por tais fontes energéticas demanda um aumento contínuo na eficiência de geração de corrente elétrica dessas células. Visando o aumento da eficiência e a viabilização do uso em grande escala dessas células solares, a comunidade científica vem se mobilizando com o intuito de as otimizar por meio da utilização de poços quânticos cujo papel é fornecer bandas intermediárias de transição ótica. Com isso, essa nova geração de dispositivos, respondem adequadamente à necessidade de aumento da eficiência de conversão elétrica. O uso de subbandas eletrônicas geradas a partir do confinamento quântico na região dos poços quânticos possibilita caminhos alternativos para absorção de fótons de menor frequência, estendendo o espectro de captação solar e, conseqüentemente, possibilitando o melhor aproveitamento da luz. Dessa forma, foi proposta a análise das propriedades das células solares de banda intermediária. Para tanto, foram desenvolvidos algoritmos numéricos para a resolução da equação de Schroedinger independente do tempo, escritos por meio da linguagem de programação Julia, desenvolvida pelo MIT (*Massachusetts Institute of Technology*). Para a resolução da equação foram usados dois métodos; o *Fourier Grid Hamiltonian* que consiste em encontrar os autovalores e autofunções do Hamiltoniano, que descrevem o movimento eletrônico na célula solar, e o DVR (*discrete variable representation*) que além de resultar nos autovalores e autofunções é estendido para sistemas contendo massas efetivas distintas entre as camadas de semicondutores, componentes da célula solar. Aplicado os métodos foi possível, a partir da diagonalização da matriz do hamiltoniano, obter os autoestados e autoenergias do sistema. Com estes valores foi possível calcular e analisar os estados energéticos ligados e não ligados ao poço de potencial, assim como as taxas de transição entre níveis energéticos. Por fim foi feita uma rápida comparação entre as eficiências dos métodos.

Palavras chave: Células solares, bandas intermediárias, DVR, massa efetiva, poços quânticos, semicondutor, Fourier Grid Hamiltonian

Lista de ilustrações

Figura 1 – Representação de Material Isolante	10
Figura 2 – Representação da Banda Intermediária Entre Bandas	12
Figura 3 – Poço de Potencial	19
Figura 4 – Comparação da Absorção com os Estados Energéticos	21
Figura 5 – Comparação da Absorção com os Estados Energéticos Sob Campo Elétrico .	22
Figura 6 – Massa Efetiva e Poço de Potencial	23
Figura 7 – Comparação da Absorção com os Estados Energéticos	24
Figura 8 – Taxa de absorção Eletrônica Com Campo Elétrico	24

Lista de tabelas

Tabela 1 – Comparação entre as 10 primeiras energias dos métodos FGH e DVR sem a ação do campo elétrico	25
Tabela 2 – Comparação entre as 10 primeiras energias dos métodos FGH e DVR sob a ação do campo elétrico	26
Tabela 3 – 5 primeiras energias para transição no método FGH	26
Tabela 4 – 5 primeiras energias para transição no método DVR	27

Sumário

Sumário	7	
1	Introdução	8
2	Revisão Bibliográfica	9
2.1	Bandas Energéticas	9
2.2	Semicondutores	10
2.3	Células Solares	11
2.3.1	Células Solares de Banda Intermediária	12
2.4	Aproximação de massa efetiva	13
2.5	Linguagem de programação Julia	14
3	Metodologia	14
3.1	<i>Fourier Grid Hamiltonian</i> (FGH)	14
3.2	<i>Discrete Variable Representation</i> (DVR) com massa dependente da posição	17
4	Resultados	19
4.1	Fourier Grid Hamiltonian	19
4.2	DVR com massa dependente da posição	22
4.3	Comparação Entre os Métodos DVR e FGH	25
5	Conclusão	27
Referências	29	

1 Introdução

Células solares são dispositivos fotovoltaicos que geram corrente elétrica a partir da absorção de fótons, principalmente na região visível do espectro eletromagnético. Na presença de um potencial elétrico, os pares de portadores são separados e removidos do dispositivo na forma de corrente elétrica por contatos adjacentes à célula [1, 2].

O uso e o aprimoramento de células solares se mostram necessários por conta da grande demanda de energia limpa e renovável. A procura pela utilização dessas células se dá pela preocupação do uso em grande escala de fontes de energias não renováveis, que além de serem limitadas, são um dos motivos da intensificação do efeito estufa [3–7].

A preocupação pelo uso de fontes esgotáveis e poluentes tem mobilizado os cientistas e os governos. Como resolução para esse problema, foi objetivado o uso de energias limpas, como eólica, solar, hidroelétrica, dentre outras. Contudo, à exceção da hidroelétrica, o uso dessas fontes em grande escala atualmente não é viável por conta do grande custo de produção e da baixa eficiência das mesmas comparadas à energia gerada a partir de combustíveis fósseis [3, 4]. De modo geral, dispositivos que usam fontes de energia limpa e renovável necessitam de um aprimoramento estrutural com o objetivo de aumentar a eficiência das mesmas e torná-las mais acessíveis. Com base nisso, a comunidade científica têm se movido com o intuito de desenvolver métodos para o aumento da produção de corrente elétrica a partir de fontes renováveis [4, 5].

O que torna o uso de células solares inviável é justamente sua ineficiência em relação ao preço de produção e venda, que ainda não são comparáveis às energias não renováveis, que possuem custo baixo e eficiência relativamente alta. Portanto o desenvolvimento das células solares está limitado à eficiência de geração de corrente e essa limitação está condicionada à efeitos de origem quântica [8–10].

As células solares que nos interessam analisar são as células solares de banda intermediária (CSBI), essas que apresentam um estado energético confinado na região de poços quânticos representando uma banda intermediária, permitindo a absorção de fótons com energia intermediária ao gap do semicondutor, determinando corrente através da estrutura [1, 2, 11–15].

A análise destas células requer a resolução da equação de Schroedinger, cerne da mecânica quântica. A resolução desta equação para potenciais que simulam uma banda intermediária é complexa (às vezes impossível) para se resolver analiticamente, portanto, a resolução numérica é necessária. Esta resolução foi feita com dois métodos, o *Fourier Grid Hamiltonian* (FGH) e o *Discrete Variable Representation* (DVR) [16], este último leva em consideração a aproximação de massa efetiva dependente da posição na heteroestrutura. Ambos tem como objetivo os autovalores do operador Hamiltoniano, que descreve as energias associadas ao sistema.

A resolução numérica para este tipo de análise exige um custo computacional elevado, tanto de Hardware como de Software. Portanto foi usado para a resolução da equação a linguagem computacional de alto padrão Julia [17]. A linguagem Julia apresenta desempenho superior à outras disponíveis no mercado e se mostra bastante eficaz no uso científico. A linguagem é

distribuída de forma gratuita e conta com uma enorme biblioteca de funções que facilitam a execução do projeto.

2 Revisão Bibliográfica

O material utilizado para o desenvolvimento de células solares de banda intermediária são os semicondutores, suas propriedades serão apresentadas no próximo tópico.

2.1 Bandas Energéticas

Nos materiais, os portadores de carga assumem energias específicas determinadas por uma estrutura de bandas de energia, em função de seu número de onda. A formação de bandas energéticas acontece quando múltiplos átomos estão interagindo uns com os outros. Para entendermos a formação destas bandas, é necessário imaginar primeiramente dois átomos afastados um do outro. A parte espacial das autofunções dos elétrons contidos nos átomos depende das autofunções espaciais dos átomos individuais, portanto, os níveis de energia deste sistema tem uma dupla degenerescência de troca, em que a função de onda total do sistema apresenta a propriedade de ser simétrica ou antissimétrica dependendo da combinação individual das autofunções espaciais dos átomos.

No caso da autofunção total do sistema de elétrons a degenerescência de troca é antissimétrica por se tratar de férmions. Uma vez que a autofunção de spin é antissimétrica, a função de onda espacial deve ser simétrica. Quando aproximamos estes dois átomos, a degenerescência de troca desaparece e as autofunções dos mesmos se superpõem, desdobrando um dado nível energético em dois. A distância entre a separação dos níveis de energia é inversamente proporcional ao espaço entre os átomos portanto, quanto mais estão próximos, maior é a separação, limitada pelo parâmetro de rede do material [18].

Os conceitos também são válidos para múltiplos átomos, se ao invés de dois, fossem três, teríamos uma degenerescência tripla e, ao aproximá-los, cada nível energético dos átomos se desdobrariam em três níveis diferentes [18].

Os estados permitidos para as órbitas eletrônicas são correspondentes às subcamadas mais internas do átomo, que são mais estreitas. Indo para as camadas mais externas, essas subcamadas vão se alargando para uma certa separação interatômica. Isto acontece por conta da energia dos elétrons, quanto mais externa a subcamada, mais energia o elétron tem e, conseqüentemente, necessita de uma região maior para se movimentar, aumentando a interação com os íons vizinhos. Este fenômeno faz com que haja estados proibidos para os elétrons em certas regiões dos átomos. As regiões nas quais as funções de onda eletrônicas são nulas, dando origem aos estados proibidos, é conhecida como band gap.

2.2 Semicondutores

A ocupação das bandas de energia nos sólidos define se este é um metal, isolante ou semicondutor.

Os Semicondutores formam uma classe especial de materiais sólidos cujas propriedades são intermediárias aos metais e aos isolantes. Sua versatilidade é proveniente de sua estrutura eletrônica que se aproxima muito da estrutura de bandas de um isolante típico para zero Kelvin de temperatura [9, 10].

Estamos tratando aqui de sistemas cristalinos nos quais os átomos que formam o semicondutor se encontram uniformemente distribuídos em uma rede periódica, com parâmetro de rede bem definido. Nessa aproximação, os elétrons das camadas mais externas dos átomos têm suas funções de onda estendidas e superpostas nos diversos núcleos dos átomos da rede. Para preservar o princípio de exclusão de Pauli, tais funções de onda se degeneram dando origem a uma estrutura eletrônica formada por bandas de energia, como foi discutido na seção anterior. Tais bandas são formadas por estados acessíveis aos elétrons na estrutura cristalina, cujo preenchimento determina as propriedades óticas, térmicas e de transporte do material.

Esse é um modelo bem geral para materiais sólidos e a diferenciação entre os metais, isolantes e semicondutores se dá justamente pelo preenchimento das bandas de energia com elétrons. No caso de metais, a última banda é parcialmente preenchida, de forma que os elétrons, excitados por campos externos (luz, voltagem, temperatura), possuem estados vagos para condução, daí a característica de bons condutores de corrente e temperatura. Já no caso dos isolantes, a última banda totalmente preenchida por elétrons (banda de valência) é separada da primeira banda completamente vazia (banda de condução) por um gap energético, como esquematiza a figura 1.

Figura 1 – Representação de Material Isolante



Fonte: João Victor de Almeida

Na região do gap, a menos da presença de impurezas na rede cristalina, as funções de onda eletrônicas tendem a ser nulas. O que difere um semicondutor de um isolante é justamente o tamanho do gap. Enquanto que, em um isolante o gap é da ordem de alguns elétron-volts,

no semicondutor é da ordem de alguns mili-eletronvolts. O pequeno tamanho do gap nesses semicondutores permite que os elétrons na banda de valência possam ser excitados até a banda de condução a partir da temperatura aplicada na estrutura ou por meio da interação com campos eletromagnéticos (luz), aumentando significativamente sua condutividade elétrica [9].

Para tornar o transporte de elétrons em semicondutores ainda mais eficaz, os semicondutores podem ser dopados intencionalmente, adicionando impurezas na sua rede cristalina. Tais impurezas são átomos diferentes da constituição padrão do semicondutor com mais ou menos elétrons, gerando um desequilíbrio de carga no material [10]. Vale salientar que a carga líquida no material continua neutra, o que acontece é que ao substituir um átomo com 11 elétrons, por exemplo, por um com 12 elétrons, estamos também adicionando um próton, o que faz com que a carga líquida seja nula. O que acontece no material é que agora esse elétron adicional se comporta como se fosse livre na rede cristalina, podendo se ligar à outros átomos. Podemos ter dois tipos de semicondutores dopados, um com excesso de elétrons, chamado de tipo n, e aqueles com falta de elétrons, chamados de tipo p.

A junção dos dois tipos de semicondutores dopados (tipo n e tipo p) dá origem às junções p-n, que são heteroestruturas muito usadas na eletrônica atual. Tais heteroestruturas são empregadas desde simples leds (light emitting diodes), até circuitos mais complexos com milhares de transistores – os chamados circuitos integrados [1, 11–15].

2.3 Células Solares

Assim como descrito anteriormente, células solares são dispositivos optoeletrônicos capazes de absorver radiação eletromagnética, fótons, com frequências no espectro de emissão solar e gerar corrente elétrica.

A principal figura de mérito que qualifica as células solares é sua eficiência de conversão elétrica. Dentre os modelos que descrevem essa eficiência destaca-se o Modelo de Shockley-Queisser (SQ). Nesse modelo para células solares de apenas uma junção p-n [19], é definido um limite fundamental superior de eficiência de cerca de 30%, relacionado à absorção deficitária de fótons pela estrutura e fatores termodinâmicos. Esse limite, é devido as restritas frequências do espectro eletromagnético que a célula é capaz de absorver, definido pelo gap do material. Ou seja, somente fótons com energia superiores à do gap do material podem excitar elétrons da banda de valência para a banda de condução, os quais podem ser extraídos das células na forma de corrente elétrica. As células comerciais, por exemplo, feitas a partir de Germânio e Silício, apresentam uma pequena eficiência de no máximo 20%.

A maior dificuldade então, está em ultrapassar o limite de Shockley-Queisser e produzir uma célula que seja capaz de absorver todas, ou boa parte, das frequências do espectro eletromagnético.

As chamadas células Tandem, formadas pela combinação de junções p-n, construídas para absorver parte do espectro solar, apresentam eficiência teórica de até 40%. Porém, a construção

dessas células exige um controle muito preciso na deposição das camadas do semicondutor, tornando-a uma célula muito difícil de ser fabricada e, conseqüentemente, de alto custo, impossibilitando suprir a grande demanda.

Uma alternativa às células comerciais e às células Tandem, são as células solares de banda intermediária (CSBI).

2.3.1 Células Solares de Banda Intermediária

Assim como apontado anteriormente, o maior problema com células solares de junção p-n única é o limite SQ. Para superar tal limite, vem sendo estudadas as CSBI. Esses dispositivos contam com uma banda intermediária entre a banda de valência e a banda de condução. Essa banda intermediária ajuda na absorção de fótons, mas se mantém isolada eletricamente das outras bandas [1, 13]. Nessa configuração, geram-se novos canais de absorção de fótons, por meio de processos diretos e indiretos de transição ótica nos quais os elétrons podem ser excitados da camada de valência para a camada de condução e também indiretamente por meio da banda intermediária. A figura 2 é uma representação visual dos caminhos de absorções possibilitados pela banda intermediária.

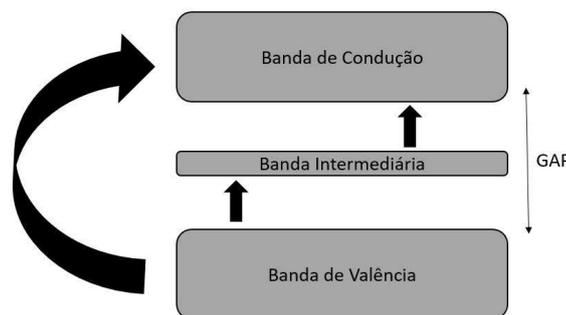


Figura 2 – Representação da Banda Intermediária Entre Bandas

Ao possibilitar absorção de fótons com diferentes frequências, a banda intermediária permite uma geração de corrente adicional, por meio de absorção sequencial de fótons múltiplos e sem reduzir a voltagem significativamente [1]. Assim esse tipo de célula pode chegar, a princípio, a uma eficiência de até 60% por conta do aumento da absorção do espectro eletromagnético.

Uma proposta de obtenção da banda intermediária para uso como célula solar é a partir do confinamento quântico em estruturas de poços quânticos [11]. Assim uma subbanda eletrônica definida pelo confinamento de elétrons na banda de condução do semicondutor pode ser utilizada como a banda intermediária. Dessa maneira o elétron de valência pode ser opticamente excitado até a subbanda menos energética da camada de condução e em seguida para o contínuo de estados acima do poço quântico, gerando corrente elétrica.

O processo ótico gerador de corrente na CSBI é em essência um processo de dois fótons,

onde o primeiro fóton é responsável por excitar o elétron da banda de valência até a banda intermediária e o segundo fóton responsável por excitar o elétron da banda intermediária até a banda de condução. Para tanto, o fóton que fará a excitação entre a banda intermediária e a banda de condução deve ser absorvido enquanto o elétron esteja confinado na subbanda intermediária. Esse é o principal problema na operação desse tipo de célula solar. Isso porque os tempos de vida dos elétrons confinados em estados do poço quântico são bastante curtos, de forma que a eficiência do processo de absorção do segundo fóton fica limitado. Assim, os mecanismos de controle desse processo devem ser entendidos em detalhes [9, 11].

Para poder compreender esses processos de transporte e transições óticas é necessário entendimento básico de mecânica quântica, a partir da resolução da equação de Schroedinger. O desenvolvimento de células solares de banda intermediária mais eficientes ainda é um problema em aberto, necessitando de estudos e novos métodos que melhor descrevam e analisem CSBI.

2.4 Aproximação de massa efetiva

Afim de simular a dinâmica de absorção e de transporte de elétrons nas CSBI, precisamos de aproximações para a interação dos elétrons com a estrutura cristalina do semiconductor, determinando o potencial eletrônico utilizado na solução da equação de Schroedinger. As principais aproximações na física de heteroestruturas semicondutoras são as aproximações de banda parabólica e de massa efetiva.

A aproximação que foi utilizada no trabalho é a aproximação de massa efetiva, na qual um sistemas de muitos elétrons que descrevem a dinâmica eletrônica no sólido pode ser resolvido com base no problema de um único elétron, sujeito a um potencial médio associado às interações com os demais elétrons e com os núcleos atômicos. A partir da estrutura de bandas, as principais propriedades óticas e elétricas em sólidos podem ser descritas próximas aos centro da zona de Brillouin para energias próximas ao topo da banda de valência e ao fundo da banda de condução, na região do band gap. Nessa região, o potencial médio pode ser substituído por uma massa efetiva dependente da banda de energia e do material.

Na aproximação de massa efetiva, o potencial atômico é descrito como um potencial médio e a massa do elétron sujeito a tal potencial é determinada pela curvatura das bandas de valência e de condução. Ou seja, para determinarmos a massa do portador de carga na estrutura devemos ter acesso à relação de dispersão $E(k)$, onde k é o número de onda.

Uma aproximação bastante comum está em considerar que próximo ao centro da primeira zona de Brillouin, a relação de dispersão é parabólica, isso porque a energia do sistema é relacionada ao número de onda quadraticamente, como no caso de uma partícula livre, com massa efetiva m^*

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \quad (1)$$

onde m^* é a massa efetiva e \hbar é a constante de Planck dividida por 2π [20]. Com base nessa aproximação e a partir do operador energia cinética, responsável por descrever o comportamento energético da partícula estudada a partir do seu momento

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 |\psi_{n,k}\rangle = E |\psi_{n,k}\rangle. \quad (2)$$

Pode-se obter a relação para a massa efetiva isolando-a da equação acima

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E(k)}{\partial k^2} \quad (3)$$

O uso da aproximação da massa efetiva é coerente no estudo de heteroestruturas, essas que são caracterizadas pela combinação de diferentes materiais no semiconductor. A diferença entre os materiais dispostos na estrutura é o band gap que, quando associados geram uma descontinuidade no perfil de potencial para os elétrons na estrutura. Portanto é necessário, com uso da aproximação de massa efetiva, considerar uma massa efetiva para o elétron em cada região do potencial, caracterizada por diferentes materiais. A equação de Schoedinger é a soma da energia cinética, mostrada na equação (2), com o potencial que descreve a descontinuidade associada à junção de diferentes materiais. Se juntarmos uma camada de material de gap inferior entre camadas de gaps maiores, temos a formação de um perfil de potencial de poço quântico, este que é a base para o nosso estudo em CSBI.

2.5 Linguagem de programação Julia

As CSBI foram analisadas a partir da resolução da equação de Schroedinger. Dada a complexidade desta equação, é necessário um tratamento computacional a partir de uma linguagem confiável, de alto padrão e com rápida resposta.

Para resolução dos métodos que serão apresentados nas seções abaixo, foi usado a linguagem de programação Julia [17], desenvolvida pelo MIT (*Massachussets Institute of Technology*). Se trata de uma linguagem de alto padrão e performance, apresenta uma grande gama de bibliotecas de funções e é distribuída como um software gratuito. Pela boa estrutura, interface simples e por conter um compilador em tempo real (JIT – just-in-time), a linguagem Julia sai à frente de outras linguagens no mercado para o uso em programação científica.

3 Metodologia

3.1 *Fourier Grid Hamiltonian* (FGH)

Para resolvermos a equação de Schroedinger independente do tempo foram usados dois métodos o *Fourier Grid Hamiltonian* (FGH) e o *Discreve Variable Representation* (DVR). No FGH [21], método este que nos permite colocar a equação de Schroedinger numa representação dual, das posições e dos momentos, de modo que cada operador do operador Hamiltoniano é

projetado em uma base específica. O método permite obter diretamente os elementos de matriz do Hamiltoniano do sistema e a diagonalização dessa matriz fornece seus respectivos autovetores e autovalores [9].

Os estados de uma partícula submetida a um potencial unidimensional são obtidos a partir da equação de Schroedinger independente do tempo

$$\hat{H}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle. \quad (4)$$

Esta é uma equação de autovalores e autovetores, onde \hat{H} é o operador Hamiltoniano, caracterizado pela soma do operador de energia cinética com o de energia potencial da partícula. A análise matemática deste tipo de problema é simplificada com o uso da notação de Dirac, onde os vetores são representados pelos bras $\langle |$ e pelos kets $| \rangle$. $|\psi_n\rangle$ e E_n são os respectivos autovetores e autoenergias do Hamiltoniano.

$$\hat{H} = \hat{T} + V(\hat{x}) = \frac{\hat{P}^2}{2m} + V(\hat{x}), \quad (5)$$

Para tornar mais simples a resolução da equação, no método *Fourier Grid Hamiltonian*, escrevemos cada operador na base onde ele é diagonal.

Na representação de Schroedinger, o vetor base é escrito como sendo $|x\rangle$, do qual é autovetor do operador posição \hat{x}

$$\hat{x}|x\rangle = x|x\rangle. \quad (6)$$

Pode-se relacionar a ortogonalidade e completeza do vetor para uma representação qualquer do espaço de Hilbert. O espaço de Hilbert é um espaço abstrato que pode ser entendido como um análogo ao espaço Euclidiano, porém com dimensões ilimitadas ortonormais entre si.

$$\langle x'|x\rangle = \delta(x' - x) \quad (7)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\hat{x}\rangle\langle x|dx = 1, \quad (8)$$

onde $\delta(x' - x)$ é o delta de Dirac e a equação (8) representa uma matriz identidade.

A energia potencial neste caso é dependente apenas da posição, $V(\hat{x})$, sua representação na base das posições é obtida a partir das equações (6) e (7)

$$\langle x'|V(\hat{x})|x\rangle = V(\hat{x})\delta(x' - x). \quad (9)$$

Olhando agora para o operador momento linear, o qual segue a relação de De Broglie, $\hat{p} = \hbar\hat{k}$, onde \hbar é a constante de Planck dividida por 2π e \hat{k} é o operador vetor de onda, temos que $|k\rangle$ é autovetor do operador \hat{k} e do operador momento linear.

$$\hat{p}|k\rangle = \hbar k|k\rangle. \quad (10)$$

Este subespaço segue uma relação de completeza análoga ao subespaço das posições

$$\langle k'|k\rangle = \delta(k' - k) \quad (11)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |k\rangle\langle k|dk = 1. \quad (12)$$

A transformada de Fourier no subespaço $|x\rangle$ resulta no subespaço $|k\rangle$, e o elemento de matriz que relaciona essas representações é dado por

$$\langle k|x\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-ikx}. \quad (13)$$

Portanto, a projeção no subespaço das posições acompanhado da relação de completeza na função de Schroedinger independente do tempo pode ser representada como

$$\int dx[\langle x'|\hat{H}|x\rangle - E_n\delta(x' - x)]\psi_n(x) = 0. \quad (14)$$

Esse sistema somente tem solução se o determinante da subtração entre o operador hamiltoniano e a soma das energias cinética e potencial no subespaço das posições for igual a zero.

A partir disso pode-se calcular os elementos de matriz de \hat{H} no subespaço das posições. O subespaço das posições não é autovetor do operador energia cinética, apenas do operador de energia potencial, portanto, é necessário projetar ao termo de energia cinética do operador \hat{H} no subespaço $|k\rangle$.

$$\langle x'|\hat{H}|x\rangle = \int dk\langle x'|\hat{T}|k\rangle\langle k|x\rangle + V(x)\delta(x' - x). \quad (15)$$

A partir do desenvolvimento da equação acima, chegamos na equação analítica

$$\langle x|\hat{H}|x'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ik(x-x')}T_k dk + V(x)\delta(x' - x). \quad (16)$$

Os autovalores e autovetores do Hamiltoniano são encontrados ao diagonalizar a matriz.

Equações deste tipo são trabalhosas ou inviáveis de se resolver analiticamente, portanto é necessária uma implementação numérica. O subespaço das posições é representado numa grade de tamanho x_i , onde Δx é o espaçamento entre pontos, portanto

$$x_i = i\Delta x, \quad (17)$$

sendo i o número de pontos da grade.

Considerando N o número total de pontos dessa grade, o tamanho total da grade pode ser definido como $N\Delta x$. A partir disso é construído uma grade no subespaço k , onde é determinado o maior comprimento de onda e a menor frequência em relação à k .

$$\Delta k = \frac{2\pi}{N\Delta x}. \quad (18)$$

Os pontos da grade são distribuídos igualmente em torno do ponto $k = 0$, portanto o mesmo é descrito da forma

$$2n = (N - 1). \quad (19)$$

No Hamiltoniano os elementos de matriz podem ser descritos como

$$H_{ij} = \frac{1}{\Delta x} \left\{ \sum_{l=-n}^n \frac{e^{il2\pi(i-j)/N}}{N} T_l + V(x_i)\delta_{ij} \right\}. \quad (20)$$

Usando a relação de Euler, podemos reduzir a equação e escreve-la como

$$H_{ij} = \frac{1}{\Delta x} \left\{ \frac{2}{N} \sum_{l=1}^n \cos\left(\frac{l2\pi(i-j)}{N}\right) T_l + V x_i \delta_{ij} \right\}. \quad (21)$$

Os autovetores e autovalores na forma discreta são encontrados a partir da diagonalização do operador Hamiltoniano

$$\det \left[H_{ij} - \frac{E_n \delta_{ij}}{\Delta x} \right] = 0 \quad (22)$$

Para resolver o problema de células solares, o potencial da junção p-n com poços quânticos é descrito numericamente em uma grade com a mesma quantidade de pontos do Hamiltoniano e os elementos de matriz são construídos. A matriz é então diagonalizada determinando seus autovetores e autovalores, que nesse caso específico são os autoestados e as autoenergias da célula solar. Para isso é utilizada a linguagem de programação Julia.

3.2 *Discrete Variable Representation* (DVR) com massa dependente da posição

No método DVR com massa variável, assim com o no método FGH, é construída uma grade que descreve o Hamiltoniano. Desta vez, ao invés de assumir uma massa constante por toda a grade, o método tem como base a utilização da aproximação de massa efetiva associada à posição da partícula.

O desenvolvimento metodológico, assim como no FGH parte do Hamiltoniano independente do tempo

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad (23)$$

Para sistemas onde a massa varia em função da posição, para preservar hermiticidade, o Hamiltoniano deve ser simetrizado e se torna

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \vec{\nabla} \cdot \left(\frac{1}{m^*(\mathbf{x})} \vec{\nabla} \right) + \tilde{V}(\mathbf{x}). \quad (24)$$

O potencial efetivo \tilde{V} na equação (24) é representado pela banda de condução do material e pode, além disso, conter interação Coulombiana entre elétrons e buracos. A forma mostrada para a energia cinética na equação (24) impõe uma condição bem conhecida em que a função de onda é contínua em todo espaço, bem como sua derivada ponderada pelas massas em cada camada.

Usando as relações de completeza para uma base qualquer $\{|k\rangle\}$ (não necessariamente a base dos momentum como no caso do FGH), escrevemos uma expressão genérica para a energia cinética como sendo

$$\langle i | \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} | j \rangle \equiv \sum_{k,k'} \langle i | \frac{\partial}{\partial x} | k \rangle \langle k | \frac{1}{m^*} | k' \rangle \langle k' | \frac{\partial}{\partial x} | j \rangle = \sum_k \frac{1}{m_k^*} \langle i | \frac{\partial}{\partial x} | k \rangle \langle k | \frac{\partial}{\partial x} | j \rangle. \quad (25)$$

Escolhemos uma base apropriada de autoestados do operador $\partial/\partial x$, como a de ondas planas,

$$\phi_n = \frac{1}{\sqrt{b-a}} \exp \left[i2\pi \frac{x-a}{b-a} \right], \quad (26)$$

onde $n = 0, \dots, \pm N$ e (a, b) são os limites da grade, com $2N + 1$ pontos espaçados igualmente

$$x_k = a + \frac{(b-a)k}{(2N+1)} \quad k = 1, \dots, 2N+1.$$

O espaçamento da grade é portanto

$$\Delta x = \frac{(b-a)}{2N+1}.$$

O ponto $x = a$ não está na grade devido a condição periódica de contorno $\phi_n(a) = \phi_n(b)$. A matriz DVR do primeiro operador derivada se torna

$$\begin{aligned} \langle k | \frac{\partial}{\partial x} | j \rangle &= \frac{\Delta x}{b-a} \sum_{n=-N}^N \exp \left[i2\pi n \frac{x_k - a}{b-a} \right] \left(\frac{\partial}{\partial x} \exp \left[i2\pi n \frac{x - a}{b-a} \right] \right)_{x=x_j} = \\ &= \frac{2\pi i}{2N+1} \frac{1}{b-a} \sum_{n=-N}^N n \exp \left[i2\pi n \frac{j-k}{2N+1} \right]. \end{aligned} \quad (27)$$

A soma na equação (27) pode ser calculada analiticamente [22], resultando em

$$\langle k | \frac{\partial}{\partial x} | j \rangle = -\frac{\pi}{b-a} \frac{(-1)^{k-j}}{\sin \left[\pi \frac{k-j}{2N+1} \right]}. \quad (28)$$

Com $k = j$ sendo 0. Podemos notar que a equação acima é derivada de um número ímpar de pontos na grade, $2N + 1$. Substituindo a equação (28) na equação (25) obtemos:

$$\langle i | \frac{\partial}{\partial x} \frac{1}{m^*} \frac{\partial}{\partial x} | j \rangle = (-1)^{i-j} \frac{\pi^2}{(b-a)^2} \sum_{k \neq i,j}^{2N+1} \frac{1}{m^*} \frac{1}{\sin \left[\pi \frac{i-k}{2N+1} \right] \sin \left[\pi \frac{k-j}{2N+1} \right]}. \quad (29)$$

A equação (29) multiplicada pela constante $-\hbar^2/2$ representa a energia cinética do Hamiltoniano que, somada ao potencial, pode ser diagonalizada resultando nas autoenergias e autofunções do operador.

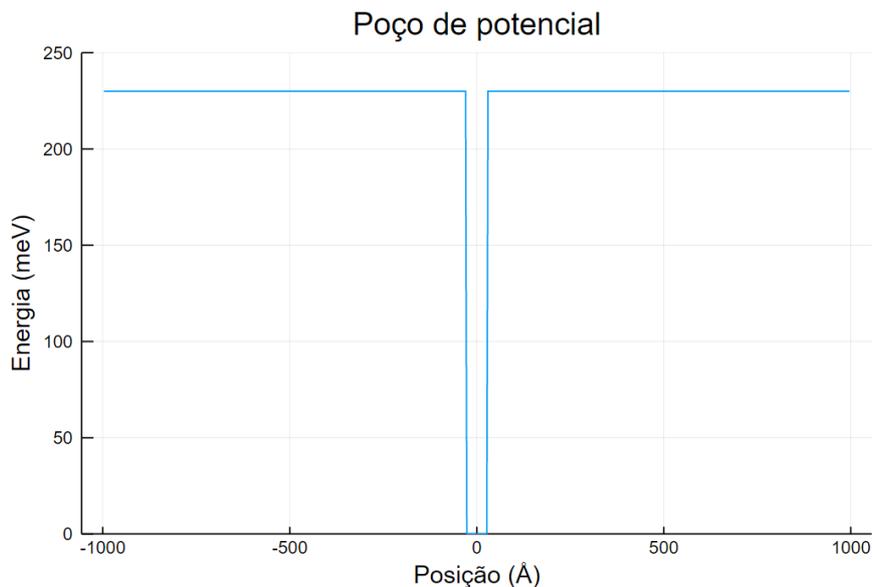
O programa escrito para a resolução da equação de Schroedinger teve os parâmetros escolhidos com base em valores encontrados na literatura [23].

4 Resultados

4.1 Fourier Grid Hamiltonian

Para escrever o algoritmo para a resolução da equação de Schroedinger independente do tempo a partir do método *Fourier Grid Hamiltonian* os parâmetros foram utilizados com base na referência [23], assim pudemos comparar os valores obtidos com a literatura. O potencial da equação foi escrito como uma grade de 1000 pontos simulando um poço quântico de potencial finito. Sua representação gráfica é mostrada na figura 3.

Figura 3 – Poço de Potencial



Fonte: João Victor de Almeida

Os parâmetros foram ajustados para que o programa gerasse uma aproximação fiel comparada à semicondutores de banda intermediária. O material utilizado para a implementação numérica no poço de potencial foi o Arseneto de Gálio e a massa efetiva do elétron $m = 0,067$, constante durante todo o algoritmo. Outros parâmetros como o tamanho da grade, a largura e a profundidade do poço foram definidos como 1000 Å, 56 Å e 230 meV, respectivamente, com o objetivo de padronizar os valores de energia dos dois métodos e assim comparar suas eficiências.

Definidos os parâmetros iniciais e gerado o poço de potencial, foi feita a construção do Hamiltoniano, como mostra a equação (21), que descreve as energias do sistema.

Após construído, o Hamiltoniano foi diagonalizado resultando nos autoestados e autoenergias. Com esses valores foi possível analisar os estados energéticos ligados e não ligados ao poço de potencial, denotando assim as possíveis transições eletrônicas entre os estados.

No método FGH, as funções de ondas não ligadas no FGH são periódicas, devido à periodicidade da transformada de Fourier, de modo que funções pares e ímpares se degeneram. Para contornar este problema o potencial foi delimitado por duas barreiras, uma em cada extremidade, simulando um poço infinito envolvendo o poço finito. Assim foi possível observar as funções de onda como estacionárias, as quais puderam ser utilizadas para os demais cálculos envolvendo a estrutura.

Com os estados energéticos definidos foi calculado a taxa de absorção energética pela Regra de Ouro de Fermi. A absorção foi definida como mostra a equação (30).

$$\alpha(\hbar\omega) \sim \sum_f |\langle \psi_i | -x | \psi_f \rangle|^2 \delta(\hbar\omega - E_f - E_i), \quad (30)$$

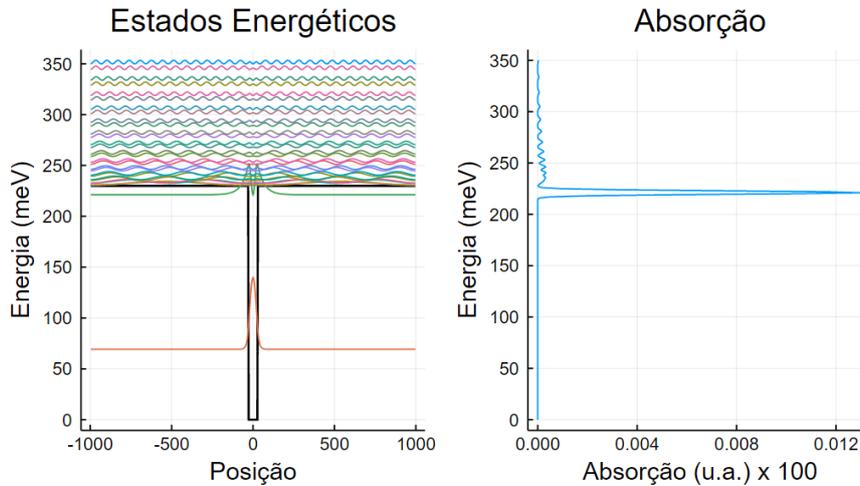
A Regra de Ouro de Fermi define a taxa de probabilidade em que o estado inicial, $|\psi_i\rangle$, é transicionado até os estados de maior energia $|\psi_f\rangle$ devido a uma perturbação representada pela grade que descreve o Hamiltoniano x . A função delta de Dirac define máximos de transição para energias ressonantes com a separação de energia entre os estados.

Os estados, bem como o potencial e a absorção foram apresentados na figura 4. Cada pico no gráfico da direita da figura, representa a taxa de absorção em função da energia necessária para a transição, no caso de células solares essa energia é devida aos fótons.

No painel da direita da figura 4, a taxa de absorção foi disposta paralelamente aos estados energéticos. As escalas estão coerentes de modo que cada pico representa uma taxa de absorção associada aos estados energéticos visualizado no painel da esquerda da figura com as funções de onda no potencial.

Em nossa análise, o estado fundamental do poço quântico representa a banda intermediária da célula solar de banda intermediária. Podemos supor que a transição da banda de valência para a banda de condução já ocorreu e a absorção do segundo fóton foi representada pelo pico na absorção. Contudo o máximo de absorção ocorre para um estado ligado no poço quântico. Nesse sentido, o elétron continua confinado no poço e nenhuma corrente líquida foi adicionada

Figura 4 – Comparação da Absorção com os Estados Energéticos



Fonte: João Victor de Almeida

à corrente do dispositivo pelo segundo processo de absorção. Uma maneira de conseguirmos uma contribuição efetiva para a corrente total da célula solar seria estreitar o poço de potencial de modo que a energia do segundo estado seria provavelmente aumentada o levando para o contínuo. Outra forma seria substituir o material das barreiras, reduzindo a profundidade do poço.

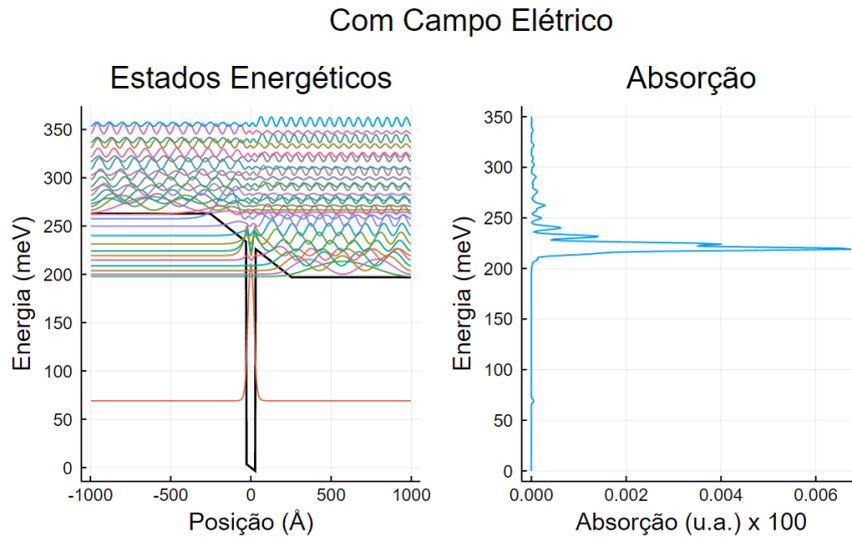
As células solares são compostas por uma junção p-n a qual possui um campo elétrico intrínseco devido ao alinhamento dos níveis de Fermi nas camadas p e n. Esse alinhamento gera uma depleção na região interior às camadas, na qual a estrutura de poço quântico foi inserida. Essa depleção gera uma deformação no perfil de potencial e pode ser simulada como a ação de um campo elétrico estático somado ao potencial da heteroestrutura.

Até então as funções de onda estão sob a ação de um potencial neutro, sem nenhum tipo de auxílio externo, porém, é possível montar um potencial que simule um campo elétrico sobre os estados energéticos.

Com a ação do campo elétrico intrínseco existem mais funções de onda que oscilam para fora do potencial, ou seja, mais elétrons podem ser captados pelos contatos adjacentes, promovendo uma corrente mais eficaz.

A figura 5 mostra a relação entre a taxa de absorção energética e os estados energéticos no poço. Podemos perceber que a principal diferença entre as transições eletrônicas com campo elétrico e sem campo elétrico, está no pico de absorção. No caso com campo elétrico a transição ocorre para um estado contínuo, não confinado no poço de potencial, podendo contribuir significativamente na geração de corrente.

Figura 5 – Comparação da Absorção com os Estados Energéticos Sob Campo Elétrico



Fonte: João Victor de Almeida

4.2 DVR com massa dependente da posição

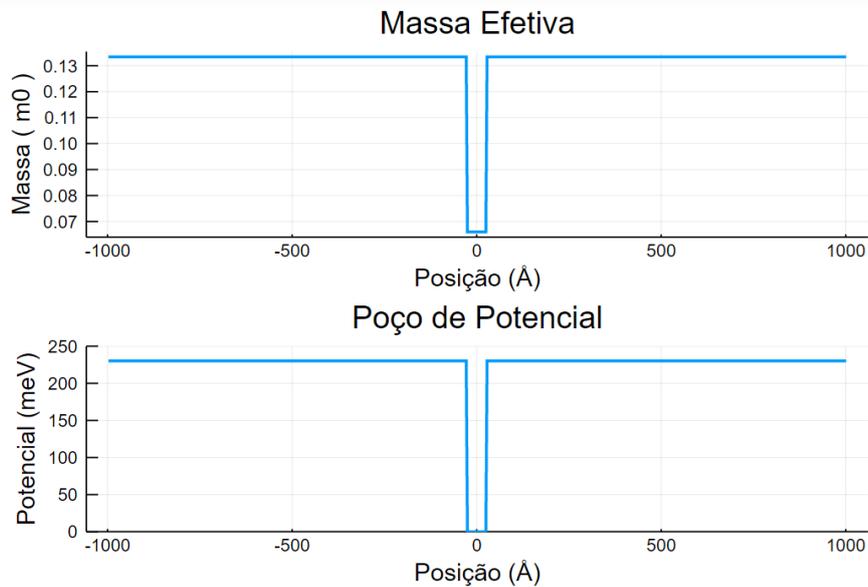
Até o presente momento, a massa efetiva eletrônica foi considerada constante na estrutura. No entanto, o dispositivo sob análise é formado pela junção entre diferentes materiais semicondutores, que por mais similares que sejam, ainda assim apresentam massas efetivas diferentes entre si. Para contornar esse problema, utilizamos o método DVR (*Discrete variable Representation*), no qual uma base específica é escolhida para a expansão das funções de onda, permitindo tratar o Hamiltoniano sujeito à massas dependentes da posição.

Assim como no FGH, o método DVR utiliza como base um grade dividida em N pontos. Os parâmetros usados para a construção da grade foi $a = -1001$, para o limite inferior e $b = 1001$ pontos para o limite superior. N , o número total de pontos da grade definido por $N = 2n + 1$, possui 601 pontos, espaçados uniformemente. Portanto a grade vai de -1001 à 1001 divididos em 601 pontos. A equação (29) foi escrita com base nessa grade.

Após definidos os parâmetros iniciais para a construção da grade, foi construída a função para a massa variável e para o potencial na forma de poço quântico. A massa dependente da posição foi escrita com base na grade para dois materiais diferentes: Arseneto de Gálio com Alumínio (AlGaAs), com uma massa de $0,1334 m_0$, e o Arseneto de Gálio (GaAs) com a massa de $0,066 m_0$ (onde m_0 é a massa do elétron livre). Sua representação é parecida com a do poço de potencial, que possui largura de 56 \AA e profundidade de 230 meV , assim os autovalores de energia ligados estão muito próximos da altura da barreira potencial, de modo que as funções de onda correspondentes se estendam por uma grande distância fora do poço [23]. A figura 6 apresenta a massa variável com a posição e o poço de potencial.

Feita a construção da massa variável com a posição e do poço de potencial, foi feito a

Figura 6 – Massa Efetiva e Poço de Potencial



Fonte: João Victor de Almeida

montagem da matriz do hamiltoniano a partir da equação (24). Esta matriz foi diagonalizada resultando nas autoenergias e autoestados do operador.

Neste método as funções de onda não ligadas ao poço de potencial são barradas pelas fronteiras da grade, assim as funções de onda não são estendidas infinitamente como elétrons livres, aparecem como ondas estacionárias, como se houvesse paredes infinitas (ou suficientemente altas) confinando-as.

A quantidade de funções de onda ligadas e não ligadas ao poço de potencial dependem diretamente da largura e da altura do poço. Como já foi dito, os valores foram escolhidos para que as energias estivessem de acordo com a literatura. Vale lembrar que o estado fundamental do poço representa a banda intermediária, responsável pela absorção do segundo fóton (já que estamos considerando que o primeiro já foi absorvido e exitou o elétron até o estado fundamental) que irá transicionar até o próximo nível energético.

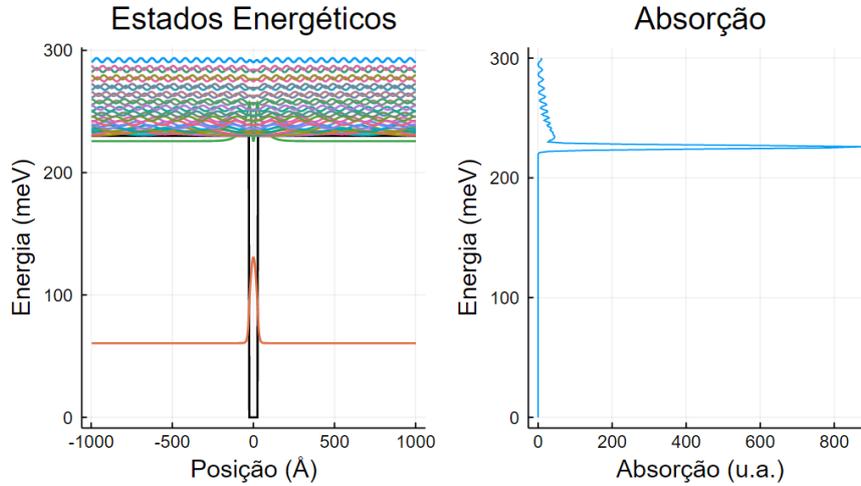
Com os valores das energias sob a ação do poço de potencial, foi calculado a taxa de absorção eletrônica por meio da Regra de Ouro de Fermi, como mostra a equação (30).

Com o objetivo de tornar mais visual o efeito de absorção, na figura 7 o gráfico da absorção é disposta, assim como feito no FGH, paralelamente aos estados energéticos no poço de potencial. Assim cada pico representa, também visualmente, as possibilidades de transição entre estados energéticos em função da energia necessária para a absorção.

É possível perceber que o pico de maior absorção ocorre para um estado confinado ao poço, o que impede a captação do elétron excitado pelos contatos adjacentes. As possíveis soluções, como foi discutido na seção anterior, dependem dos parâmetros que compõem o potencial.

Como é denotado na figura 7, as funções de onda no potencial, assim como a absorção

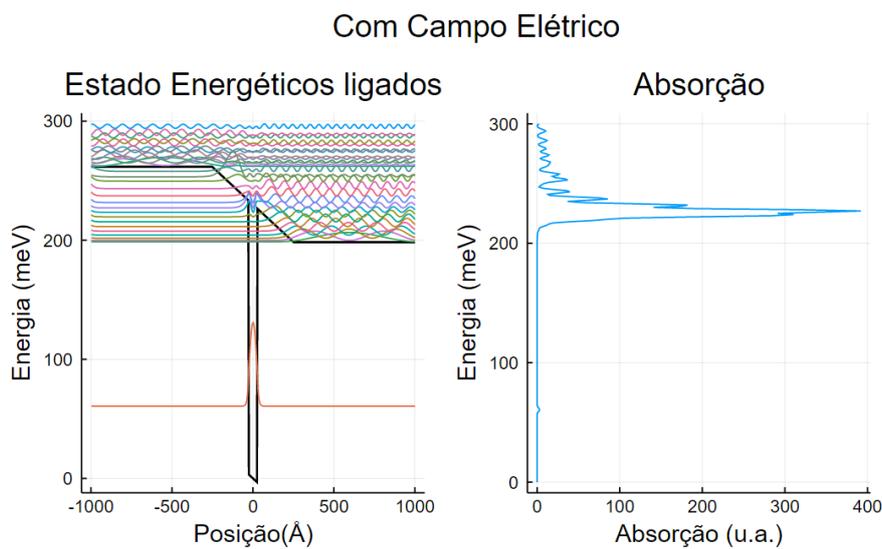
Figura 7 – Comparação da Absorção com os Estados Energéticos



Fonte: João Victor de Almeida

foram simuladas sem nenhum agente externo como o campo elétrico. Como foi discutido na seção anterior, as células solares compostas por uma junção p-n possuem um campo intrínseco, gerando a depleção na região do poço quântico. Mais uma vez essa depleção foi simulada no potencial, gerando uma nova dinâmica aos processos de absorção. A figura 8 mostra a relação entre a taxa de absorção e os estados energéticos sob a ação de um potencial com campo elétrico intrínseco.

Figura 8 – Taxa de absorção Eletrônica Com Campo Elétrico



Fonte: João Victor de Almeida

É evidente a maior quantidade de picos e suas larguras na região de oscilação das funções

de onda, onde há a inclinação do poço simulando a ação do campo elétrico. Se compararmos as figuras 7 e 8, fica claro a influência do campo na taxa de absorção, além de que as transições são ocorridas para estados no contínuo, fora do confinamento.

4.3 Comparação Entre os Métodos DVR e FGH

Apresentados os resultados dos dois métodos, podemos agora discutir as principais diferenças associado a cada um.

Tanto o FGH quanto o DVR são parecidos no quesito eficiência e na própria construção do algoritmo. Em ambos é utilizado uma grade uniforme que representa a base das posições. A principal diferença entre os métodos está na construção da massa, no FGH a massa é constante durante todo o dispositivo, diferente do DVR, que possui a massa dependente da posição e, portanto, se torna mais próximo à realidade em relação ao Fourier Grid.

Para a quantidade de pontos escolhidos para a construção da grade, 601, ambos os métodos se mostraram bem rápidos na execução, sem diferenças significativas.

A tabela 1 mostra os 10 primeiros valores das autoenergias extraídas do hamiltoniano com o potencial sem ação do campo elétrico, nos dois métodos e a diferença entre eles em porcentagem.

Tabela 1 – Comparação entre as 10 primeiras energias dos métodos FGH e DVR sem a ação do campo elétrico

Sem Campo Elétrico		
10 Primeiras Energias DVR (meV)	10 Primeiras Energias FGH (meV)	Diferença (%)
60.639	69.212	12.387
225.736	221.193	2.012
230.074	230.590	0.224
230.343	230.682	0.147
230.667	232.359	0.728
231.355	232.699	0.577
231.852	235.306	1.468
233.007	235.991	1.265
233.630	239.429	2.422
235.273	240.509	2.177

Fonte: João Victor de Almeida

O mesmo tipo de comparação foi feito para o potencial sob a influência do campo elétrico, como mostra a tabela 2.

Com o foi discutido na seção anterior, as energias apresentadas são dispostas a partir do estado fundamental, representando a banda intermediária, portanto, para sabermos qual deve ser

Tabela 2 – Comparação entre as 10 primeiras energias dos métodos FGH e DVR sob a ação do campo elétrico

Com Campo Elétrico		
10 Primeiras Energias DVR (meV)	10 Primeiras Energias FGH (meV)	Diferença (%)
60.612	69.174	12.378
198.700	197.840	0.433
199.847	200.142	0.147
201.742	203.900	1.059
204.349	208.945	2.199
207.608	214.753	3.327
211.401	219.391	3.642
215.516	224.209	3.877
219.660	231.543	5.132
223.521	240.177	6.935

Fonte: João Victor de Almeida

a energia total necessária para excitar o elétron da banda de valência até a banda de condução, é necessário somar a energia do gap do material à energia do estado fundamental. Com o valor total da energia necessária para a absorção, podemos compará-las com o espectro de luz visível do sol e, assim, associar a eficiência dos métodos.

A tabela 3 mostra as energias necessárias para a transição da banda de valência à banda de condução nos métodos FGH e DVR com e sem campo elétrico.

Tabela 3 – 5 primeiras energias para transição no método FGH

Energias de transição (meV)	
Sem campo elétrico	Com campo elétrico
1727.963	1681.332
1746.756	1685.935
1746.940	1693.452
1750.294	1703.542
1750.974	1715.158

Fonte: João Victor de Almeida

Tabela 4 – 5 primeiras energias para transição no método DVR

Energias de transição (meV)	
Sem campo elétrico	Com campo elétrico
1754.195	1700.176
1762.871	1702.471
1763.408	1706.260
1764.056	1711.476
1765.433	1717.993

Fonte: João Victor de Almeida

As energias acima foram calculadas pela diferença entre os estados energéticos com o estado fundamental, somado do band gap do material, no caso o Arseneto de Gálio, que possui um band gap de 1424 meV [24].

O energia dos fótons no espectro da luz visível varia de 1600 meV a 3100 meV, portanto, quando comparado as energias de transição, podemos perceber a eficácia na absorção, sendo que quase todo o espectro de luz emitida pelo sol é suficiente para transicionar os elétrons de estado no material.

5 Conclusão

Levando em consideração as diferenças entre os métodos, principalmente a variação da massa no DVR, as energias estão coerentes. Sem o potencial com a depleção causada pela junção p-n, simulando o campo elétrico, houve um diferença média de 1,336%, já com o campo elétrico a diferença média foi um pouco maior, com o valor médio de 3,484%.

Pudemos perceber também que os parâmetros escolhidos para um material que não tenha o potencial com o campo elétrico intrínseco, o maior pico de absorção ocorre para um estado ligado ao poço de potencial, o que não é interessante no caso de células solares pois estes não podem ser drenados pelos contatos adjacentes e, conseqüentemente, não influenciam na corrente. Em contrapartida a simulação de potenciais com campo elétrico intrínseco (materiais de junção p-n), possuem apenas um estado confinado ao poço de potencial, portanto, como pode ser observado nas figuras 5 e 8, os picos de absorção de maior intensidade acontece para estados eletrônicos não confinados, que podem ser captados pelos contatos adjacentes gerando corrente elétrica. Portanto as CSBI de junção p-n se mostram eficientes e capazes de aumentar significativamente a geração de corrente elétrica.

Além das análises físicas presentes neste trabalho, podemos destacar algumas outras implicações importantes. O aprimoramento das células solares é uma discussão atual e pertinente que, além de promover energia sustentável, mostra o uso da física quântica na obtenção direta de vantagens sociais. Todo professor de física percebe no primeiro momento que uma das principais dificuldades dos alunos em relação a disciplina é a associação dos conceitos com

a realidade, daí uma das utilidades de trabalhos como este é justamente trazer significado para a física a partir de um problema atual e real.

A abstenção da física moderna no ensino médio impede os jovens de se integrar a evolução tecnológica que, além de os manter na ignorância em relação aos acontecimentos científicos atuais, impede a associação dos estudos da física com problemas reais. Por fim, trabalhos como este mostram cada vez mais a importância do estudo da física moderna a nível de ensino médio e também de graduação.

Referências

- [1] A. Luque and A. Martí, “Increasing the efficiency of ideal solar cells by photon induced transitions at intermediate levels,” *Physical Review Letters*, vol. 78, no. 26, p. 5014, 1997.
- [2] A. Mellor, A. Luque, I. Tobías, and A. Martí, “The feasibility of high-efficiency inas/gaas quantum dot intermediate band solar cells,” *Solar Energy Materials and Solar Cells*, vol. 130, pp. 225–233, 2014.
- [3] ENERDATA, “Global Energy Intelligence. Yearbook..” Disponível em: “www.enerdata.net”. Acesso em 4 de Março de 2018.
- [4] D. Pottmaier, C. Melo, M. Sartor, S. Kuester, T. Amadio, C. Fernandes, D. Marinha, and O. Alarcon, “The brazilian energy matrix: From a materials science and engineering perspective,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 19, pp. 678–691, 2013.
- [5] C. Cristiane Farias, M. A. V. Freitas, P. Marcio Giannini, N. Fidelis, *et al.*, “The renewable energy market in brazil: Current status and potential,” *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 2012.
- [6] I. Statistics, “Co2 emissions from fuel combustion-highlights,” *IEA, Paris* <http://www.iea.org/co2highlights/co2highlights.pdf>. Cited July, 2011.
- [7] W. E. Council, “World energy resources,” *London: World Energy Council*, 2013.
- [8] J. Singh, *Electronic and optoelectronic properties of semiconductor structures*. Cambridge University Press, 2007.
- [9] G. Bastard, “Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures,” 1990.
- [10] J. W. Swart, “Conceitos básicos para semicondutores,” *UNICAMP. CAMPINAS*. www.ccs.unicamp.br/cursos/fe107/download/cap02.pdf, 2011.
- [11] M. Yoshida, N. Ekins-Daukes, D. Farrell, and C. Phillips, “Photon ratchet intermediate band solar cells,” *Applied Physics Letters*, vol. 100, no. 26, p. 263902, 2012.
- [12] A. Kechiantz, L. Kocharyan, and H. Kechiyants, “Band alignment and conversion efficiency in si/ge type-ii quantum dot intermediate band solar cells,” *Nanotechnology*, vol. 18, no. 40, p. 405401, 2007.
- [13] A. Luque, A. Martí, and C. Stanley, “Understanding intermediate-band solar cells,” *Nature Photonics*, vol. 6, no. 3, pp. nphoton–2012, 2012.

-
- [14] A. Pusch, M. Yoshida, N. P. Hylton, A. Mellor, C. C. Phillips, O. Hess, and N. J. Ekins-Daukes, “Limiting efficiencies for intermediate band solar cells with partial absorptivity: the case for a quantum ratchet,” *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, vol. 24, no. 5, pp. 656–662, 2016.
- [15] R. Jakomin, R. Kawabata, R. Mourão, D. Micha, M. Pires, H. Xie, A. Fischer, F. Ponce, and P. Souza, “Inas quantum dot growth on al x ga_{1-x} as by metalorganic vapor phase epitaxy for intermediate band solar cells,” *Journal of Applied Physics*, vol. 116, no. 9, p. 093511, 2014.
- [16] A. L. Kaledin, T. Lian, C. L. Hill, and D. G. Musaev, “An infinite order discrete variable representation of an effective mass hamiltonian: Application to exciton wave functions in quantum confined nanostructures,” *Journal of chemical theory and computation*, vol. 10, no. 8, pp. 3409–3416, 2014.
- [17] Massachusetts Institute of Technology, “The Julia Language.” Disponível em: ”<https://julialang.org/>”. Acesso em 4 de Março de 2018.
- [18] R. Eisberg and R. Resnick, “Quantum physics of atoms, molecules, solids, nuclei, and particles,” *Quantum Physics of Atoms, Molecules, Solids, Nuclei, and Particles, 2nd Edition*, by Robert Eisberg, Robert Resnick, pp. 864. ISBN 0-471-87373-X. Wiley-VCH, January 1985., p. 864, 1985.
- [19] W. Shockley and H. J. Queisser, “Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells,” *Journal of applied physics*, vol. 32, no. 3, pp. 510–519, 1961.
- [20] F. Alharbi, “An explicit fdm calculation of nonparabolicity effects in energy states of quantum wells,” *Optical and quantum electronics*, vol. 40, no. 8, pp. 551–559, 2008.
- [21] C. C. Marston and G. G. Balint-Kurti, “The fourier grid hamiltonian method for bound state eigenvalues and eigenfunctions,” *The Journal of chemical physics*, vol. 91, no. 6, pp. 3571–3576, 1989.
- [22] I. Tuvi and Y. Band, “Hermiticity of the hamiltonian matrix in a discrete variable representation,” *The Journal of chemical physics*, vol. 107, no. 21, pp. 9079–9084, 1997.
- [23] I.-H. Tan, G. Snider, L. Chang, and E. Hu, “A self-consistent solution of schrödinger–poisson equations using a nonuniform mesh,” *Journal of applied physics*, vol. 68, no. 8, pp. 4071–4076, 1990.
- [24] C. Kittel, “Solid state physics,” *Wiley, New York*, vol. 19, 1976.