

## TD-DFT NO ESTUDO DE POÇOS QUÂNTICOS DUPLOS OSCILANTES

Guilherme Francisco Comassetto<sup>1</sup> Daniel Vieira<sup>2</sup>

Palavras-chave: Teoria do Funcional da Densidade Dependente do Tempo, Poços Quânticos, Heteroestruturas

Heteroestruturas semicondutoras são exemplos de sistemas físicos em que os modelos tradicionais de poços quânticos podem ser realizados em laboratório. A semelhança com as abordagens padrão livro-texto, no entanto, resume-se ao poço em si, já que a presença de muitos elétrons interagentes faz com que um tratamento analítico exato não mais seja possível. Utilizamos o formalismo da Teoria do Funcional da Densidade Dependente do Tempo (TD-DFT) a fim de estudar poços quânticos duplos oscilantes, especificamente delineados para representarem a junção de Heteroestruturas de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Em virtude das oscilações, elétrons inicialmente confinados podem escapar, dando origem ao que podemos interpretar como uma corrente elétrica induzida. Além de introduzir o estudante ao ambiente de pesquisa em TD-DFT, visamos estudar como a probabilidade de escape de elétrons varia com a frequência das oscilações, constituindo o primeiro passo de um projeto futuro maior, em que desejamos analisar a corrente elétrica gerada por meio de vibração molecular fotoinduzida.

---

<sup>1</sup> Acadêmico do Curso de Engenharia Elétrica, CCT-UDESC, bolsista de iniciação científica PROBIC/UDESC.

<sup>2</sup> Orientador, Professor do Departamento de Física, CCT-UDESC – danielv@joinville.udesc.br.