

RESEARCH PAPER

Exploração e Otimização de Estruturas de Quantum Bragg Mirror Detectors (QBMDs) via Inteligência Artificial

Exploration and Optimization of Quantum Bragg Mirror Detector (QBMD) Structures via Artificial Intelligence

Diogo Tuler Chaves [Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) | diogochaves@dcc.ufmg.br]
Rafael Martins Gomes [Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) | rafaelgomes@dcc.ufmg.br]
Paula D'Agostini Alvares Maciel [Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) | pauladagostini@dcc.ufmg.br]
João Marcos Campos [Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) | joaomarcosc campos@dcc.ufmg.br]
Germano Maioli Penello [Universidade de São Paulo (USP) | gpenello@if.usp.br]
Guilherme Monteiro Torelly [Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro (PUC-Rio) | torelly@puc-rio.br]
Omar Paranaíba Vilela Neto [Universidade Federal de Minas Gerais (UFMG) | omar@dcc.ufmg.br]

Departamento de Ciência da Computação, Instituto de Ciências Exatas, Universidade Federal de Minas Gerais, Av. Antônio Carlos, 6627, Pampulha, Belo Horizonte, MG, 31270-901, Brasil.

Resumo. *Quantum Bragg Mirror Detectors* (QBMDs) são fotodetectores semicondutores promissores, porém seu projeto envolve um espaço de busca restrito, multidimensional e dependente de simulações físicas custosas. Este trabalho propõe um pipeline de inteligência artificial para otimização de QBMDs, integrando otimização Bayesiana multiobjetivo, simulação física pelo *e-mulate* e modelos surrogate. As estruturas são representadas por sete parâmetros estruturais, incluindo o número de poços nos espelhos esquerdo e direito e as espessuras dos poços, barreiras laterais e poço central. O desempenho é avaliado a partir de métricas extraídas da fotocorrente: energia e intensidade do pico, fator de qualidade e fração do pico principal. A otimização permite identificar compromissos entre objetivos por meio da fronteira de Pareto. Além disso, os dados válidos simulados treinam modelos substitutos capazes de estimar rapidamente novas configurações, reduzindo custos computacionais e apoiando o desenvolvimento eficiente de QBMDs. Também fornece base reprodutível para análises comparativas e futuras extensões experimentais posteriores.

Abstract. Quantum Bragg Mirror Detectors (QBMDs) are promising semiconductor photodetectors whose design involves a constrained, high-dimensional search space and computationally expensive transfer-matrix simulations. This work presents an artificial intelligence pipeline for QBMD optimization that combines multiobjective Bayesian optimization with surrogate modeling. Seven structural parameters are optimized with the *e-mulate* simulator, considering four physical performance metrics and their Pareto trade-offs. The generated data are then used to train a machine-learning surrogate for fast performance prediction. Results show that the proposed approach identifies promising non-dominated designs while substantially reducing the cost of design-space exploration, supporting more efficient QBMD development.

Palavras-chave: QBMDs, Otimização Bayesiana, Modelo Surrogate, *e-mulate*, Optoeletrônica

Keywords: QBMDs, Bayesian Optimization, Surrogate Model, *e-mulate*, Optoelectronics

Recebido/Received: 16 June 2026 • Aceito/Accepted: 17 June 2026 • Publicado/Published: 17 July 2026

1 Introdução

Fotodetectores infravermelhos baseados em poços quânticos e super-redes têm sido amplamente estudados como plataformas para detecção espectralmente seletiva. Dentro dessa linha, os *Quantum Bragg Mirror Detectors* (QBMDs) exploram estados ligados ou quase ligados no contínuo, cuja engenharia estrutural permite controlar a energia de detecção, a seletividade espectral e a direção preferencial de extração eletrônica [Capasso et al., 1992; Guerra et al., 2016; Penello et al., 2018, 2019].

A literatura recente mostra que essa classe de dispositivos já foi utilizada para detecção além do *bandoffset*, operação fotovoltaica em super-redes assimétricas, resposta dual-color e sintonia espectral por tensão [Guerra et al., 2016; Penello et al., 2018; Pereira et al., 2022; Penello et al., 2023, 2024]. Esses resultados evidenciam o potencial dos QBMDs, mas também mostram que seu projeto é altamente sensível aos

parâmetros geométricos da heteroestrutura.

Neste trabalho, cada estrutura candidata é avaliada com o simulador físico *e-mulate*, que calcula propriedades optoeletrônicas de sistemas de poços quânticos, como estados eletrônicos, funções de onda, absorção e fotocorrente. Embora preserve a fidelidade física do problema, esse processo torna a exploração do espaço de projeto computacionalmente cara e sujeita a limitações numéricas típicas de métodos baseados em matriz de transferência [Pereira et al., 2021; Jirauschek, 2009].

Para lidar com esse cenário, propomos um pipeline que combina otimização Bayesiana multiobjetivo e modelagem *surrogate*. A otimização é guiada pelo *e-mulate*, enquanto as simulações válidas produzidas ao longo da busca são reutilizadas para treinar um modelo substituto capaz de aproximar rapidamente as saídas do simulador. Com isso, o trabalho se posiciona na interseção entre projeto de dispositivos optoele-

trônicos, otimização automatizada e aprendizado de máquina aplicado.

As contribuições deste artigo são:

1. a proposição de um pipeline para o projeto de QBMDs que integra simulação física, otimização Bayesiana multiobjetivo e modelagem *surrogate*;
2. o tratamento sistemático das falhas numéricas do simulador na construção de um *dataset* físico robusto;
3. o desenvolvimento de um modelo *surrogate* capaz de acelerar a triagem de novas estruturas e apoiar etapas futuras de otimização orientada por aprendizado.

2 Trabalhos Relacionados

A base física dos QBMDs está associada ao controle de estados eletrônicos ligados ou vazantes no contínuo em heteroestruturas semicondutoras. Trabalhos anteriores mostraram que esse tipo de engenharia pode viabilizar detecção por transições intersubbanda além do *bandoffset* do material e também operação fotovoltaica em super-redes assimétricas, explorando *leaky states* para favorecer a extração eletrônica [Guerra et al., 2016; Penello et al., 2018]. Em perspectiva mais ampla, a revisão de Penello et al. [2019] consolida a evolução dos QWIPs de super-rede simétricos e assimétricos e evidencia o potencial dessa arquitetura para dispositivos espectralmente seletivos.

Mais especificamente no contexto dos QBMDs, estudos recentes ampliaram a funcionalidade dessa plataforma. Pereira et al. [2022] demonstraram detecção dual-color em uma super-rede InGaAs/InAlAs com estados quase ligados no contínuo, enquanto Penello et al. [2023] avançaram para um QBMD dual-color sintonizável por tensão. Em seguida, Penello et al. [2024] mostraram como a engenharia das transições ópticas em QBMDs pode ser ajustada de forma fina, reforçando que pequenas mudanças estruturais afetam diretamente os estados eletrônicos e a resposta espectral do dispositivo.

No plano computacional, Pereira et al. [2021] apresentaram o *e-mulate*, software voltado ao cálculo de propriedades optoeletrônicas de sistemas de poços quânticos. No presente trabalho, esse simulador exerce o papel de avaliador físico de alta fidelidade: cada configuração proposta pelo otimizador é simulada no *e-mulate*, e suas saídas são convertidas em métricas físicas de interesse. Essa escolha diferencia a abordagem proposta de estudos puramente orientados por dados, pois o aprendizado de máquina é construído sobre uma base de simulação física.

Em relação à otimização estrutural, Póvoa et al. [2019] já exploraram algoritmos evolutivos para fotodetectores de super-rede, e Ruiz et al. [2026] aplicaram recentemente algoritmo genético à otimização de QBMDs. Nosso trabalho se diferencia por integrar, em um único pipeline, três elementos: exploração explícita de *trade-offs* multiobjetivo, tratamento sistemático das falhas numéricas do simulador e treinamento de um modelo *surrogate* para acelerar novas explorações do espaço de projeto.

3 Metodologia

O pipeline proposto possui três etapas: definição paramétrica da heteroestrutura, avaliação física com o simulador *e-mulate* e construção de um modelo *surrogate*. Primeiro, cada configuração

estrutural é gerada sob restrições físicas e de fabricação. Em seguida, essa configuração é avaliada pelo *e-mulate*, que fornece a resposta optoeletrônica do dispositivo. Por fim, as simulações válidas produzidas ao longo da busca são usadas para treinar um modelo substituto capaz de aproximar rapidamente as saídas do simulador.

A organização do pipeline foi pensada para que cada etapa produza informações úteis para a etapa seguinte. A definição paramétrica estabelece um espaço de busca fisicamente admissível, evitando que o otimizador explore configurações incompatíveis com as restrições estruturais do dispositivo. A simulação física, por sua vez, transforma cada vetor de parâmetros em uma resposta de fotocorrente, da qual são extraídas métricas diretamente relacionadas ao desempenho do detector. Finalmente, a etapa de modelagem *surrogate* reaproveita as avaliações já realizadas, convertendo o histórico de simulações em um conjunto supervisionado para regressão.

Essa estratégia também permite lidar melhor com o custo computacional do problema. Em vez de depender exclusivamente de avaliações sucessivas do simulador, o pipeline acumula conhecimento ao longo da busca. Assim, cada simulação válida contribui não apenas para a identificação de uma possível estrutura promissora, mas também para o treinamento de um modelo capaz de aproximar o comportamento do simulador em regiões semelhantes do espaço de projeto. Desse modo, a metodologia combina exploração orientada por física, otimização multiobjetivo e aprendizado estatístico em um fluxo integrado.

Outro aspecto importante é que as falhas de simulação não são tratadas como eventos isolados ou irrelevantes. Como o espaço de busca contém regiões numericamente instáveis, registrar quais configurações falham também fornece informação sobre os limites práticos da exploração. Dessa forma, o processo de otimização passa a considerar não apenas o desempenho físico esperado, mas também a viabilidade numérica das estruturas avaliadas. Essa característica é especialmente relevante em problemas de dispositivos semicondutores, nos quais pequenas alterações geométricas podem gerar mudanças significativas tanto na resposta física quanto na estabilidade computacional da simulação.

3.1 Definição da Estrutura e Restrições Físicas

A estrutura do QBMD é modelada como uma super-rede definida por 7 parâmetros geométricos principais, divididos em três regiões: espelho esquerdo (Left), poço central (Main) e espelho direito (Right). O vetor de parâmetros $\mathbf{x}$ é definido como:

$$\mathbf{x} = [N_L, t_{LQW}, t_{LQB}, t_{MQW}, N_R, t_{RQW}, t_{RQB}] \quad (1)$$

onde cada parâmetro é explicado na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros geométricos que definem a superrede do QBMD.

Parâmetro	Região	Descrição
N_L	Espelho esquerdo	Número de poços quânticos laterais à esquerda ($1 \leq N \leq 10$).
t_{LQW}	Espelho esquerdo	Espessura dos poços quânticos laterais esquerdos (nm).
t_{LQB}	Espelho esquerdo	Espessura das barreiras laterais esquerdas (nm).
t_{MQW}	Poço central	Espessura do poço quântico principal (nm).
N_R	Espelho direito	Número de poços quânticos laterais à direita ($1 \leq N \leq 10$).
t_{RQW}	Espelho direito	Espessura dos poços quânticos laterais direitos (nm).
t_{RQB}	Espelho direito	Espessura das barreiras laterais direitos (nm).

A Figura 1 exemplifica a disposição da estrutura.

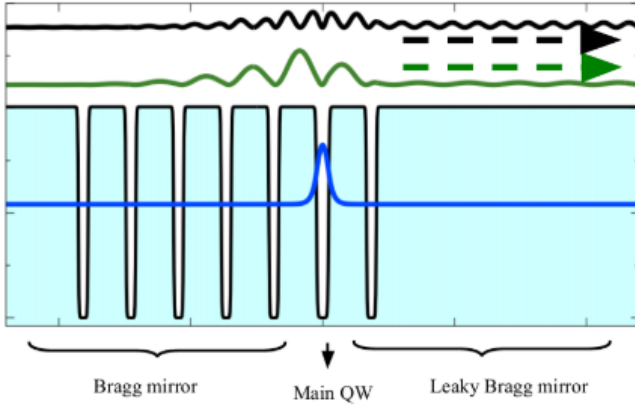


Figura 1. Exemplo de uma estrutura contendo um poço quântico ao meio e dois espelhos de Bragg nas laterais, com estados eletrônicos “leaky” no contínuo.

Para garantir a viabilidade da fabricação, impõem-se restrições rigorosas:

1. **Quantização:** todas as espessuras são arredondadas para múltiplos inteiros de uma monocamada atômica ($t_{ML} \approx 0.293$ nm).
2. **Restrição do Poço Central:** para assegurar o confinamento correto dos estados, a espessura do poço central (t_{MQW}) deve ser estritamente maior que os poços laterais, obedecendo à inequação:

$$t_{MQW} \geq \min(t_{LQW}, t_{RQW}) + 2 \times t_{ML} \quad (2)$$

Essas restrições são importantes não apenas do ponto de vista de fabricação, mas também para evitar configurações fisicamente pouco plausíveis ou incapazes de sustentar os estados eletrônicos desejados. Assim, o problema de otimização não é tratado como uma busca livre em espaço contínuo, mas como uma busca estruturada em um domínio fisicamente admissível.

3.2 Simulação Física e Limitações Numéricas

O simulador *e-mulate* exerce papel central no pipeline, pois atua como avaliador físico de alta fidelidade para cada vetor de parâmetros $\mathbf{x}$. Desenvolvido para o cálculo de propriedades optoeletrônicas de sistemas de poços quânticos [Pereira et al., 2021], ele fornece estados eletrônicos, funções de onda, espectros de absorção e curvas de fotocorrente. Neste trabalho, a fotocorrente é a principal saída utilizada na otimização.

A partir dessa curva, extraem-se as quatro métricas-alvo do problema: Energia do Pico (E_{peak}), Valor de Pico (I_{peak}), Fator de Qualidade ($Q = E_{peak}/FWHM$) e Fração do Pico Principal. Essas métricas alimentam diretamente a etapa de otimização e, posteriormente, compõem o conjunto supervisionado usado no treinamento do modelo *surrogate*.

Observou-se que estruturas com muitos períodos ($N_L, N_R \rightarrow 10$) ou barreiras muito finas tendem a gerar instabilidades numéricas. Em nossos experimentos, a taxa de sucesso das simulações foi de aproximadamente 83,5%. Em vez de descartar manualmente essas falhas, atribuímos penalidades severas às avaliações inválidas, direcionando a busca para regiões estáveis do espaço de projeto.

3.3 Otimização Bayesiana Multiobjetivo

O problema de projeto é formulado como uma otimização Bayesiana multiobjetivo, adequada a cenários em que cada avaliação do simulador possui alto custo computacional. Utilizamos Processos Gaussianos como modelo probabilístico interno e a escalarização de Chebyshev aumentada para tratar simultaneamente objetivos potencialmente conflitantes.

Dado um conjunto de objetivos $f_i(\mathbf{x})$ e um vetor de pesos $\mathbf{w}$, a função escalarizada é definida por:

$$g(\mathbf{x}) = \max_i (w_i f_i(\mathbf{x})) + \rho \sum_i w_i f_i(\mathbf{x}), \quad (3)$$

onde $\rho = 10^{-3}$ é um termo de regularização. Os pesos são amostrados de uma distribuição de Dirichlet simétrica, permitindo explorar diferentes regiões da fronteira de Pareto ao longo da busca.

3.4 Modelo Surrogate

As avaliações válidas produzidas pelo *e-mulate* ao longo das etapas de busca em grade, amostragem aleatória e otimização Bayesiana são reunidas em um arquivo de log único (`all_trials.csv`). Um script em Python filtra simulações malsucedidas, remove métricas ausentes ou inválidas e gera o arquivo final `surrogate_dataset.csv`, contendo as sete variáveis estruturais de entrada e as métricas físicas extraídas da fotocorrente.

Esse conjunto é então dividido em treino, validação e teste para o treinamento de modelos de regressão supervisionada. Foram avaliadas diferentes famílias de modelos, incluindo MLP, XGBoost, Random Forest e CatBoost, em versões por alvo e multi-saída. O *surrogate* final é composto pelo melhor modelo para cada métrica física, formando um *ensemble single-target*. Assim, o modelo substituto passa a atuar como uma aproximação computacionalmente barata do *e-mulate*, útil para triagem rápida de novas estruturas.

4 Resultados e Discussão

A aplicação da otimização multiobjetivo, combinada com a modelagem *surrogate*, permitiu não apenas acelerar o processo de design, mas também revelar características fundamentais sobre o funcionamento e as limitações dos QBMDs.

4.1 Análise de Desempenho e Trade-offs

O principal resultado da otimização é a identificação da fronteira de Pareto, que delimita as melhores soluções possíveis dentro do espaço de busca. A Figura 2 apresenta a dispersão de todas as simulações realizadas.

Os pontos em vermelho representam as configurações não dominadas. A análise desta fronteira revela *trade-offs* intrínsecos ao problema, como, por exemplo, entre proeminência e qualidade: para obter fatores de qualidade extremamente altos (picos muito estreitos), o dispositivo tende a sacrificar a pureza espectral do pico (*main peak share*), permitindo o surgimento de lóbulos laterais ou picos secundários. A diversidade de soluções na fronteira permite que o projetista escolha entre um detector ultra-seletivo ou um detector com resposta mais limpa, dependendo da aplicação final.

Esse resultado é importante porque mostra que não existe uma única configuração ótima em sentido absoluto. Em vez

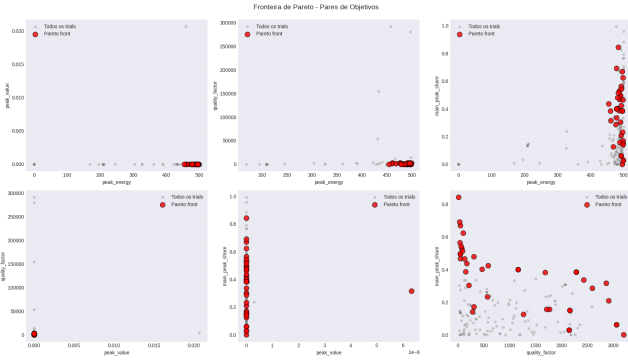


Figura 2. Espaço de objetivos visualizando todas as configurações simuladas (cinza) e a fronteira de Pareto (vermelho). O gráfico destaca o compromisso entre seletividade espectral (*quality factor*) e proeminência do pico (*main peak share*).

disso, há um conjunto de soluções eficientes, cada uma adequada a diferentes prioridades experimentais ou de aplicação. Assim, a fronteira de Pareto deixa de ser apenas uma ferramenta matemática e passa a atuar como um mapa prático de decisão de projeto.

4.2 Interpretação Física

Para compreender quais características físicas governam esses resultados, analisamos a correlação estatística entre as variáveis de projeto e as métricas de saída, conforme ilustrado na Figura 3.

A matriz revela uma correlação negativa entre a espessura dos poços (*RQWt*, *LQWt*, *MQWt*) e a largura do pico (*FWHM*). Fisicamente, isso indica que o alargamento dos poços quânticos tende a aproximar os níveis de energia, resultando em bandas de absorção mais estreitas e, consequentemente, maior seletividade espectral.

Esse tipo de interpretação é valioso porque confere legibilidade física ao processo de otimização. Em vez de produzir apenas candidatos numéricos promissores, o pipeline também permite identificar padrões estruturais associados ao desempenho do detector, contribuindo para o entendimento do próprio dispositivo.

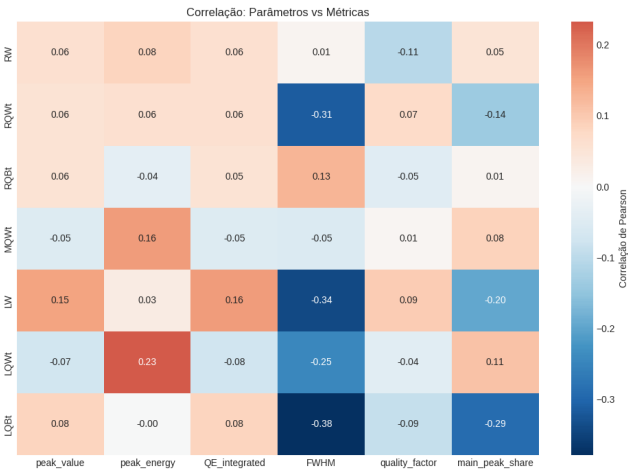


Figura 3. Matriz de correlação de Pearson. Cores quentes indicam correlação positiva e cores frias indicam correlação negativa entre parâmetros estruturais e métricas.

4.3 Robustez Numérica e Exploração do Espaço

Um obstáculo significativo superado neste trabalho foi a instabilidade numérica do método da matriz de transferência. A Figura 4 categoriza as simulações entre sucessos e falhas.

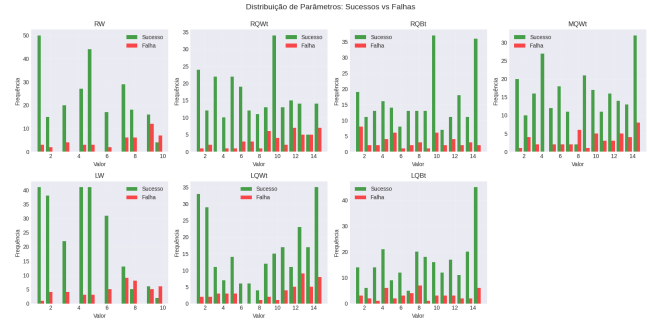


Figura 4. Análise de estabilidade do simulador. Enquanto as espessuras apresentam distribuição uniforme de erros, o número de poços (RW, LW) mostra um crescimento crítico de falhas acima de 8 repetições.

Fica evidente que o número de repetições dos espelhos (*RW* e *LW*) é o fator determinante para a convergência. Acima de 8 poços, a taxa de falha cresce de forma acentuada devido a erros de arredondamento associados à multiplicação sucessiva de matrizes. O algoritmo de otimização aprendeu a navegar nessas restrições, direcionando a busca para regiões estruturalmente mais estáveis.

Do ponto de vista metodológico, esse resultado mostra que a otimização não apenas encontra boas soluções, mas também se adapta às limitações do simulador físico. Isso reforça a utilidade da abordagem proposta em cenários reais, nos quais a presença de avaliações inválidas é um aspecto prático inevitável.

4.4 Validação do Modelo Surrogate

Para avaliar até que ponto o modelo *surrogate* reproduz fielmente as saídas do simulador *e-mulate*, o conjunto de dados foi dividido em subconjuntos de treino, validação e teste, sendo reportados aqui os resultados obtidos apenas no conjunto de teste. Para cada métrica física, calculamos medidas de erro em escala real (RMSE, MAE, R^2 , sMAPE e MASE), sempre comparando previsões do modelo com os valores obtidos diretamente pelo simulador.

A Tabela 2 sintetiza o desempenho dos modelos no regime *single-target*, em que treinamos um regressor independente para cada métrica física.

Tabela 2. Melhor modelo *single-target* por métrica física no conjunto de teste

Métrica	Modelo	Erro	Valor
Peak Value	XGBoost	MAE	1.51×10^{-8}
Peak Energy	Random Forest	MAE	1.39×10^{-1}
Quality Factor	XGBoost	MASE	0.643
Main Peak Share	CatBoost	RMSE	1.61×10^{-1}

Os valores da Tabela 2 são compatíveis com o uso do modelo em um fluxo prático de projeto. O erro absoluto na intensidade do pico está várias ordens de grandeza abaixo da variação típica entre estruturas distintas; o erro em energia do pico permanece na ordem de décimos de meV; e o fator de qualidade apresenta MASE menor que 1, indicando desempe-

nho superior a um modelo ingênuo baseado em média. Para a proeminência do pico principal, o erro é suficientemente baixo para preservar a ordenação relativa entre candidatos, o que é especialmente útil na etapa de seleção de estruturas.

Esses resultados sustentam o uso do *surrogate* como ferramenta de triagem e exploração rápida do espaço de projeto. Em vez de substituir integralmente o simulador de alta fidelidade, o modelo substituto reduz o número de avaliações caras necessárias, concentrando o esforço computacional apenas nos candidatos mais promissores.

4.5 Avaliação Comparativa das Famílias de Modelos

Embora o *surrogate* final seja composto pelos modelos *single-target* de melhor desempenho para cada métrica, o processo de treinamento também avaliou versões multi-saída de redes neurais e modelos de árvore. A comparação entre XGBoost, Random Forest e CatBoost deve ser interpretada com cautela, pois os erros observados são próximos entre si. Assim, os resultados indicam melhor desempenho médio em algumas métricas, mas não permitem afirmar dominância clara de uma família de modelos sem testes estatísticos adicionais ou análise de variância.

A Tabela 3 resume, para algumas métricas-chave, o desempenho das três principais famílias de modelos baseados em árvores.

Tabela 3. Comparação de erro entre modelos baseados em árvores no conjunto de teste

Métrica	XGBoost	Random Forest	CatBoost
Peak Value (MAE)	1.51×10^{-8}	1.50×10^{-8}	8.99×10^{-9}
Peak Energy (MAE)	1.49×10^{-1}	1.39×10^{-1}	1.36×10^{-1}
Quality Factor (MASE)	0.643	0.625	0.633

Dessa comparação emergem três pontos principais:

1. **Modelos de árvore apresentaram desempenho médio competitivo em dados tabulares pequenos:** em um cenário com poucas centenas de amostras, XGBoost, Random Forest e CatBoost obtiveram erros baixos e, em geral, resultados melhores que as redes neurais densas avaliadas.
2. **A melhor família depende do alvo:** diferentes métricas físicas foram mais bem aproximadas por diferentes modelos, o que reforça a escolha de um *ensemble single-target* em vez de uma única arquitetura global.
3. **As diferenças entre os modelos de árvore são pequenas:** embora um modelo apresente o menor erro em determinada métrica, os resultados são próximos e não sustentam uma afirmação de superioridade geral sem validação estatística mais robusta.

Do ponto de vista físico, os resíduos do *surrogate* seguem o comportamento esperado: erros menores nas regiões mais densamente amostradas do espaço de projeto e aumento gradual nas bordas, onde predominam estruturas extremas e mais sujeitas a instabilidades numéricas do simulador. Nesses casos, o *surrogate* funciona como uma ferramenta de *screening*, sugerindo candidatos promissores que podem ser reavaliados posteriormente com o simulador de alta fidelidade antes de qualquer decisão de fabricação.

5 Conclusão

Este trabalho apresentou um pipeline para o projeto de QBMDs que combina simulação física com o *e-mulate*, otimização Bayesiana multiobjetivo e modelagem *surrogate*. Os resultados mostram que a abordagem identifica configurações não dominadas promissoras, explicita os principais *trade-offs* entre métricas espectrais e lida de forma sistemática com falhas numéricas do simulador.

Além de reduzir o custo de exploração do espaço de projeto, o modelo *surrogate* mostrou-se útil como ferramenta de triagem sem romper o vínculo com a modelagem física de alta fidelidade. Como continuidade natural deste trabalho, pretende-se empregar esse modelo em um ambiente de *Reinforcement Learning*, no qual um agente possa aprender políticas de busca capazes de propor estruturas cada vez mais promissoras a partir das recompensas definidas sobre as métricas físicas. Assim, o pipeline proposto estabelece uma base prática para validação experimental e para futuras estratégias de otimização orientada por aprendizado.

Declarações complementares

Agradecimentos

Os autores agradecem às instituições envolvidas pelo suporte acadêmico e científico durante o desenvolvimento deste trabalho.

Contribuições dos autores

Todas as implementações dos códigos, a execução dos experimentos, a geração dos resultados e a organização dos arquivos computacionais foram realizadas pelos alunos Diogo T. Chaves, Rafael M. Gomes, Paula D'Agostini A. Maciel e João Marcos Campos, sob orientação do professor Omar P. Vilela Neto e com colaboração dos demais autores. A concepção do projeto, a definição da metodologia, a análise dos resultados e a redação do manuscrito foram realizadas em conjunto pelos alunos e professores envolvidos.

Conflitos de interesse

Os autores declaram que não possuem conflito de interesse.

Disponibilidade de dados e materiais

Os conjuntos de dados e/ou softwares gerados e/ou analisados durante o estudo atual serão disponibilizados mediante solicitação aos autores.

Referências

- Capasso, F., Sirtori, C., Faist, J., Sivco, D. L., Chu, S.-N. G., and Cho, A. Y. (1992). Observation of an electronic bound state above a potential well. *Nature*, 358:565–567. DOI: 10.1038/358565a0.
- Guerra, L., Penello, G. M., Pires, M. P., Pinto, L. D., Jakomin, R., Mourão, R. T., Degani, M. H., Maialle, M. Z., and Souza, P. L. (2016). Detecting infrared radiation beyond the band offset with intersubband transitions. *IEEE Photonics Technology Letters*, 28(15):1641–1644. DOI: 10.1109/LPT.2016.2554064.
- Jirouschek, C. (2009). Accuracy of transfer matrix approaches for solving the effective mass Schrödinger equation. *IEEE Journal of Quantum Electronics*, 45(9):1059–1067. DOI: 10.1109/JQE.2009.2020998.
- Penello, G. M., Pereira, P. H., Guerra, L., Pinto, L. D., Jakomin, R., Mourão, R. T., Degani, M. H., Maialle, M. Z.,

- Sivco, D., Gmachl, C. F., Pires, M. P., and Souza, P. L. (2019). Progress in symmetric and asymmetric superlattice quantum well infrared photodetectors. *Annalen der Physik*, 531(6):1800462. DOI: 10.1002/andp.201800462.
- Penello, G. M., Pereira, P. H., Pires, M. P., Sivco, D., Gmachl, C., and Souza, P. L. (2018). Leaky electronic states for photovoltaic photodetectors based on asymmetric superlattices. *Applied Physics Letters*, 112(3):033503. DOI: 10.1063/1.5006464.
- Penello, G. M., Pereira, P. H., Sousa, V. B., Kawabata, R. M. S., Pires, M. P., and Souza, P. L. (2023). Voltage-tunable dual-colour quantum bragg mirror detector (QBMD). *Opto-Electronics Review*, 31:e144559. DOI: 10.24425/opelre.2023.144559.
- Penello, G. M., Pereira, P. H., Torelly, G. M., Fernandes, F. M., Rushing, J., Tenorio, J. A., Simmonds, P., and Quivy, A. A. (2024). Tailoring optical transitions with GaAs/AlGaAs quantum bragg mirror detectors (QBMDs). *Journal of Integrated Circuits and Systems*, 19(2):1–5. DOI: 10.29292/jics.v19i2.804.
- Pereira, P. H., Penello, G. M., Sousa, V. B., Kawabata, R. M. S., Pires, M. P., and Souza, P. L. (2022). Dual-color detection using two quasi-bound states in the continuum in an InGaAs/InAlAs superlattice. In *2022 36th Symposium on Microelectronics Technology (SBMICRO)*, pages 1–4. IEEE. DOI: 10.1109/SBMICRO55822.2022.9881050.
- Pereira, P. H., Torelly, G. M., Lacerda, M. S., Souza, D. R., Ruiz, J. E., Souza, V. R., Chipana, L. A., Souza, P. L., Penello, G. M., and Pires, M. P. (2021). e-mulate: a user-friendly software to calculate optoelectronic properties of quantum well systems. In *2021 35th Symposium on Microelectronics Technology and Devices (SBMicro)*, pages 1–4. IEEE. DOI: 10.1109/SBMicro50945.2021.9585740.
- Póvoa, R. C. B. L., Pereira, P. H., Torelly, G. M., Dias, D. M., Penello, G. M., Pires, M. P., and Souza, P. L. (2019). Structural optimization of a superlattice infrared photodetector by evolutionary computation algorithms. In *2019 34th Symposium on Microelectronics Technology and Devices (SBMicro)*, pages 1–4. IEEE. DOI: 10.1109/SBMicro.2019.8919346.
- Ruiz, J. E., Pereira, P. H., Torelly, G. M., Souza, P. L., Pires, M. P., and Penello, G. M. (2026). Genetic algorithm optimization of quantum bragg mirror detectors. *APL Electronic Devices*, 2(1):016127. DOI: 10.1063/5.0315540.