

FACULTAD DE MATEMÁTICA, ASTRONOMÍA, FÍSICA Y
COMPUTACIÓN (FAMAF)

TRABAJO ESPECIAL DE LICENCIATURA EN FÍSICA

Caracterización del Decaimiento Interatómico por Interacción Coulombiana en Pozos Cuánticos Semiconductores

Javier Fernando Duarte

Director:
Dr. FEDERICO MANUEL PONT



Caracterización del Decaimiento Interatómico por Interacción Coulombiana en Pozos
Cuánticos Semiconductores © 2023 por [Javier Fernando Duarte](#) se distribuye bajo
una [Licencia Creative Commons Atribución 4.0 Internacional](#).

*A mi mamá y a Marina,
dos personas sin las cuales no habría
llegado donde estoy ahora.*

Resumen

RESUMEN

En este trabajo se busca caracterizar teórica y computacionalmente la dinámica electrónica en procesos de decaimiento por interacción coulombiana (ICD) en sistemas de pozos cuánticos semiconductores. Se estudió un modelo de masa efectiva para dos electrones interactuando en una nano-heteroestructura de pozos cuánticos de InGaAs/InAlAs. Se exploró la relación entre las resonancias de forma de un electrón y las resonancias Feshbach de dos electrones y se estimaron tiempos de decaimiento característicos del proceso ICD con técnicas dependientes e independientes del tiempo. Los resultados evidenciaron una mejoría en la eficiencia del proceso ICD por la presencia de resonancias de forma. El trabajo busca aportar conocimiento relevante sobre la dinámica electrónica en procesos ICD en sistemas de interés tecnológico.

Palabras clave:

- Dinámica Electrónica
- Pozos Cuánticos
- ICD
- Teoría Cuántica de Resonancias
- MCTDH
- Regla de Oro de Fermi

Abstract

SUMMARY

This work seeks to theoretically and computationally characterize the electronic dynamics in interatomic Coulombic decay (ICD) processes in semiconductor quantum well systems. An effective mass model was studied for two electrons interacting in an InGaAs/InAlAs quantum well nano-heterostructure. The relationship between the shape resonances of one electron and the Feshbach resonances of two electrons was explored, and characteristic decay times of the ICD process were estimated using time-dependent and time-independent techniques. The results evidenced an enhancement in the efficiency of the ICD process due to the presence of shape resonances. The work aims to provide relevant knowledge on the electronic dynamics in ICD processes in technologically relevant systems.

Keywords:

- Electronic Dynamics
- Quantum Wells
- ICD
- Quantum Theory of Resonances
- MCTDH
- Fermi Golden Rule

Índice general

1. Introducción	1
1.1. Fenómeno de Decaimiento por Interacción Coulombiana	1
1.2. Quantum Dots y Quantum Wells	2
1.3. ICD y Resonancias	2
1.4. Objetivos	5
2. Modelo para Dos QWs Semiconductores	7
2.1. Hamiltonianos de Una y Dos Partículas	9
2.2. Adimensionalización del Hamiltoniano	10
2.3. Sobre la Aplicación Numérica de la Interacción Coulombiana	12
3. Representación en Variable Discreta	15
3.1. Representaciones FBR y DVR	16
3.2. Representación Variable Discreta DVR	17
3.3. Adaptación Representación DVR-Seno	18
3.4. Optimización de Parámetros DVR-Seno Adaptada	20
3.4.1. Ajuste del Ancho de Caja de Potencial	20
3.4.2. Ajuste del Tamaño de Base Elegida	20
3.5. Condiciones de Empalme de BenDaniel-Duke	22
4. Técnicas de Evolución Temporal: MCTDH	25
4.1. Time-Dependent Hartree	25
4.2. Multiconfigurational Time-Dependent Hartree	28
4.3. Potenciales de Absorción Complejos	33
5. Estudio de Resonancias de Forma - Hamiltoniano de una Partícula	37
5.1. Densidad de Estados Local del Sistema	37
5.2. Densidad de Estados y Resonancias de Forma	39
6. Dinámica del Proceso ICD	43
6.1. Método Dependiente del Tiempo: MCTDH	43
6.1.1. Definición del Estado Inicial y Evolución Temporal	43
6.1.2. Autocorrelación y Tiempos de Decaimientos - MCTDH	44
6.2. Método Independiente del Tiempo: Regla de Oro de Fermi	45
7. Conclusiones y Perspectivas	49
A. Contratación de Resultados en Sistema Pozos Gaussianos	51
A.1. Sistema Estudiado	51

Tabla de Abreviaturas

ICD	decaimiento por interacción coulombiana (interatomic coulombic decay)
QD	puntos cuánticos (quantum dots)
QW	pozos cuánticos (quantum wells)
TDH	método de Hartree dependiente del tiempo
MCTDH	método multiconfiguracional de Hartree dependiente del tiempo
TDSE	Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo
TISE	Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo
FDVP	principio variacional de Frenkel-Dirac
CMF	campo medio constante (constant mean-field)
CAP	potenciales de absorción complejos (complex absorbing potentials)
DVR	representación en variable discreta (discrete variable representation)
FBR	representación en base finita (finite basis-set representation)
LDOS	densidad de estados local (local density of states)
DOS	densidad de estados (density of states)
FGR	regla de oro de Fermi (Fermi golden rule)
TPDT	teoría de perturbaciones dependiente del tiempo

Capítulo 1

Introducción

1.1. Fenómeno de Decaimiento por Interacción Coulombiana

El decaimiento por interacción coulombiana (interatomic coulombic decay) (ICD) es un proceso de relajación no radiativo que ocurre por la correlación entre electrones de átomos o moléculas cercanos. Fue propuesto por Cederbaum et al. en 1997 [CZT97] para describir la ionización de átomos y moléculas en estado excitado debido a la interacción con sus vecinos. Desde su formulación, el ICD ha sido estudiado intensamente dado que permite comprender interacciones a distancias intermoleculares extremadamente largas, del orden de 40-100Å [Sis+10]. Si bien este proceso se estudió inicialmente en gases, trabajos recientes demostraron su ocurrencia también en sistemas condensados, como los puntos cuánticos (quantum dots) (QD)[CM11] y agregados moleculares [Jah+20].

ICD es un proceso fundamental en física atómica y molecular, con aplicaciones en diversas áreas como la química [Jah+10], biología [Har+13] y medicina [Her12]. En este mecanismo, un átomo o molécula en un estado electrónico excitado transfiere su exceso de energía a un vecino, provocando la eyección de un electrón de este último y dejando el sistema ionizado como se muestra en la Fig. 1.1. La velocidad del proceso depende crucialmente de la densidad y distancias interatómicas, pudiendo ser el canal de decaimiento más rápido en ciertos sistemas, compitiendo con procesos como la fotoionización o procesos tipo Auger.

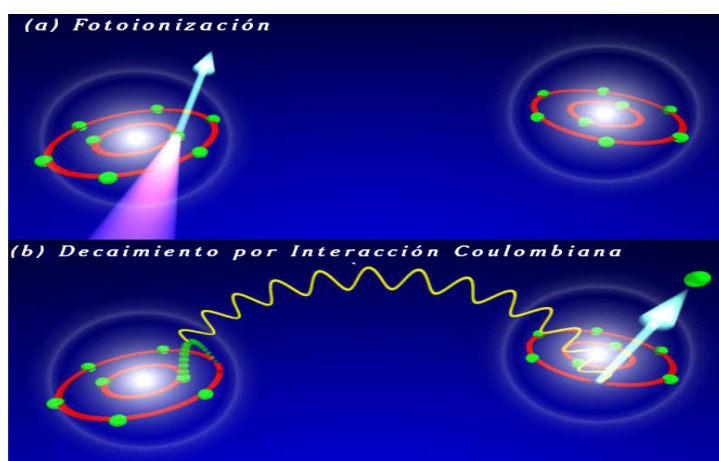


Figura 1.1: Representación esquemática del fenómeno de ICD en dímero de Ne [SCM03]. En el panel **a)** se presenta la creación de un estado inicial excitado para el sistema mediante un proceso de fotoionización de un electrón de la capa 2s de uno de los átomos. En el panel **b)** se muestra el mecanismo del ICD, la vacancia del nivel 2s es ocupada por un electrón 2p y el exceso de energía de éste es transferido a un electrón del átomo vecino produciendo la ionización de este último. Imagen tomada de [Jah+04]

El objetivo de esta tesis es estudiar teórica y computacionalmente la dinámica de los electrones involucrados en un proceso tipo ICD en un sistema de pozos cuánticos (ver Sec. 1.2) a partir de simulaciones de dinámica cuántica. Ésto permitirá comprender en detalle los tiempos característicos y así analizar la competencia entre el ICD y otros canales de relajación en estos sistemas. El trabajo busca abordar desafíos como la complejidad de modelar pozos cuánticos realistas y describir adecuadamente la dinámica electrónica. Los resultados obtenidos serán comparados con aquellos reportados en trabajos previos y pretenden proveer un conocimiento fundamental sobre el ICD y servir de guía para el diseño de QD para aplicaciones optoelectrónicas.

1.2. Quantum Dots y Quantum Wells

Los QD y pozos cuánticos (quantum wells) (QW) son nanoestructuras semiconductoras que exhiben propiedades ópticas y electrónicas únicas debido al confinamiento cuántico de los portadores de carga en escalas nanométricas, como ser la cuantización de niveles de energía y tamaño del GAP semiconductor, y que pueden ser controladas variando el tamaño y composición de la nanoestructura. [EEO85]

Los efectos de confinamiento cuántico fueron primeramente estudiados en películas delgadas durante al menos dos décadas, de 1960 a 1980 [Eli+72]. En esta etapa se encontró que la correlación de las oscilaciones en las cantidades observadas y la masa efectiva de los electrones confinados en las películas juega un papel clave. A su vez, el descubrimiento del crecimiento epitaxial por haces moleculares [Art68] [Cho71] llevó la precisión y espesor de las películas a límites en que el confinamiento cuántico era claramente detectable ($\approx 5\text{ nm}$). Ésto llevó los estudios de confinamiento cuántico a estos sistemas, en particular a heteroestructuras formadas por capas de diferentes materiales.

Desde su descubrimiento por Ekimov et al. en 1981 [EO81], los QD y QW se han convertido en objetos de intensa investigación dadas sus potenciales aplicaciones tecnológicas. Entre los usos más prometedores de los QD se encuentran dispositivos optoelectrónicos [Mic+00], paneles solares [Kam08], marcadores biológicos [Med+05] y qubits para computación cuántica [LD98]. Estas aplicaciones aprovechan propiedades como la sintonizabilidad del gap de energía con el tamaño del QD, o espesor del QW, altos rendimientos cuánticos de fluorescencia y estabilidad frente a fotoblanqueo. Tal ha sido su importancia en el desarrollo de aplicaciones tecnológicas y la comprensión de la materia atómica y molecular que el actual [Premio Nobel de Química \(2023\)](#) ha sido otorgado a Moungi Bawendi, Louis Brus y Alexei Ekimov por su descubrimiento y síntesis de los puntos cuánticos semiconductores coloidales.

El entendimiento de la estructura electrónica y dinámica de relajación en QD es crucial para optimizar estas aplicaciones. El ICD representa un canal de relajación adicional en QD junto a otros procesos como emisión de fotones, interacción con fonones [Guy+99] y relajación Auger intra-punto [FB99].

1.3. ICD y Resonancias

En el formalismo estándar de la mecánica cuántica, se establece como requisito que todos los observables de propiedades físicas estén asociados con los autovalores reales de una clase especial de operadores, llamados **operadores hermitianos**. Antes de definir la propiedad de hermiticidad de un operador, es necesario definir el **operador adjunto** asociado a un operador \hat{O} , denotado por \hat{O}^\dagger y dado por:

$$\langle \phi | \hat{O} \xi \rangle = \langle \hat{O}^\dagger \phi | \xi \rangle \quad (1.1)$$

para todos los vectores del espacio de Hilbert, y donde se utiliza el producto escalar usual de la mecánica cuántica

$$\langle \chi | \xi \rangle = \int \chi(\vec{r})^* \xi(\vec{r}) d\vec{r}$$

Luego, decimos que un operador es hermitiano si satisface

$$\hat{O} = \hat{O}^\dagger \quad (1.2)$$

La hermiticidad de un operador, depende de las propiedades del espacio de Hilbert asociado a éste. Veamos esto con un ejemplo, supongamos el hamiltoniano unidimensional de una partícula interactuando con un potencial real de corto alcance $V(x)$

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx} + V(x)$$

integrando por partes puede demostrarse que

$$\langle \phi | \hat{H} \xi \rangle = \langle \hat{H} \phi | \xi \rangle + \underbrace{\left[\frac{d\phi^*}{dx}(x) \xi(x) - \phi(x)^* \frac{d\xi}{dx}(x) \right]_{-\infty}^{\infty}}_{\text{hermiticidad} \iff =0} \quad (1.3)$$

así, tenemos que este operador es hermitiano si el último término en la ecuación anterior se anula. En particular, si las funciones del espacio de Hilbert son de cuadrado integrable (L_2), esto se cumple.

Cuando se estudian fenómenos de scattering o semi-scattering, el espacio de Hilbert sobre el que se trabaja involucra soluciones de la ecuación de Schrödinger que no son de cuadrado integrable; en estos problemas generalmente puede separarse en 2 subespacios ¹

- El de los estados ligados, cuyo espectro es discreto (finito o infinito).
- El de los estados libres, o del continuo, cuyo espectro es continuo e infinito.

Dentro del espacio de estados del continuo, pueden encontrarse estados que están caracterizados por estar fuertemente localizados en una región específica del espacio (razón por la cual son considerados como “estados ligados embebidos en el continuo”), éstos se conocen como **resonancias** (o **estados de Siegert** [Sie39]) y están asociados con *estados metaestables* de un sistema que posee la energía suficiente para separarse en dos o más subsistemas, de menor energía, estando este proceso caracterizado por un tiempo característico τ . De esta forma, los estados electrónicos excitados que emiten un electrón a través de un proceso ICD son un ejemplo de una resonancia electrónica; de aquí se desprende la importancia de la *teoría de resonancias* en el estudio de este fenómeno.

Existen diferentes tipos de mecanismos en la naturaleza que conducen a la existencia de distintos tipos de resonancias, siendo éstas [Moi98]:

- Resonancias de Forma (shape-type resonances): Están relacionadas con un confinamiento momentáneo de la “partícula” en un pozo de potencial, de allí su nombre pues se deben a la “forma” que posee el potencial del sistema. Son un fenómeno puramente cuántico producido por el efecto túnel de las partículas, y no presentan una contrapartida clásica, por ende, en el límite $\hbar \rightarrow 0$ este tipo de resonancias NO son observables. Entre los ejemplos más conocidos de potenciales que evidencian este tipo de resonancias están aquellos que describen el decaimiento radioactivo de núcleos o partículas inestables [Gam28] [GC29].

¹En la práctica se ajusta el cero de energías del sistema de forma tal que $E = 0$ representa la energía umbral que separa los subespacios

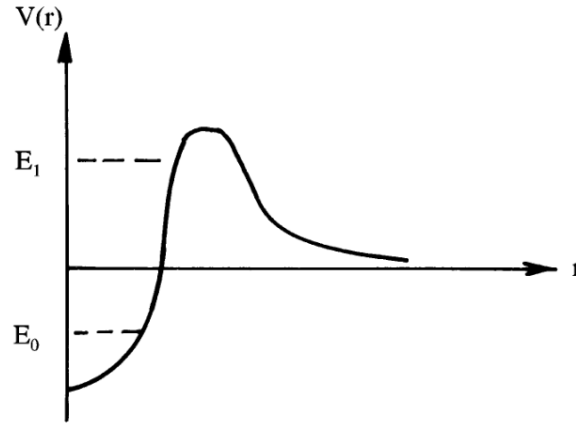


Figura 1.2: Representación esquemática del potencial de interacción entre una partícula α y núcleo en un proceso de decaimiento radioactivo.

Un punto a mencionar es que este tipo de resonancias deben su existencia sólo a la forma del potencial del sistema involucrado y no a interacciones con otras partículas y/o medio, por ende pueden estar presentes además en sistemas simples con un único grado de libertad.

- Resonancias Feshbach (Feshbach-type resonances): Este tipo de resonancias tienen su origen en un “acoplamiento” de estados producto de la interacción existente entre grados de libertad del sistema. Para ilustrar este tipo de fenómeno, consideremos un ejemplo genérico cuya aplicación será abordada en capítulos posteriores: sea $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ el hamiltoniano de un sistema, siendo \hat{V} una perturbación “pequeña” comparada con \hat{H}_0 y \hat{H}_0 un hamiltoniano (sin perturbar) cuyas soluciones exactas son conocidas

$$\begin{aligned}\hat{H}_0|\phi_n\rangle &= E_n|\phi_n\rangle \\ |\phi_n(t)\rangle &= e^{-iE_n/\hbar t}|\phi_n\rangle\end{aligned}$$

la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo para este sistema es

$$i\hbar\frac{d|\Psi(t)\rangle}{dt} = (\hat{H}_0 + \hat{V})|\Psi(t)\rangle$$

Debido a la perturbación, el sistema puede realizar transiciones de un estado inicial $|\phi_{inic}\rangle$ a un estado final $|\phi_{fin}\rangle$ (autoestados de \hat{H}_0). Si proponemos una expansión de la función de onda

$$|\Psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t)e^{-iE_n/\hbar t}|\phi_n\rangle$$

utilizando *teoría de perturbaciones dependiente del tiempo (TPDT)* se obtiene una expresión para la probabilidad de transición del estado inicial al final para el caso de \hat{V} independiente del tiempo [Zet09]:

$$P_{i\rightarrow f}(t) = \frac{1}{\hbar}|\langle\phi_{fin}|\hat{V}|\phi_{inic}\rangle|^2 2\pi t \delta(E_{fin} - E_{inic}) \quad (1.4)$$

Definiendo la tasa de transición del estado inicial al final como $\Gamma_{if} = P_{i\rightarrow f}(t)/t$ tenemos

$$\Gamma_{if} = \frac{2\pi}{\hbar}|\langle\phi_{fin}|\hat{V}|\phi_{inic}\rangle|^2 \delta(E_{fin} - E_{inic}) \quad (1.5)$$

destacamos un resultado importante: *cuando la perturbación es independiente del tiempo, sólo son posibles transiciones entre estados con la MISMA energía.*

En el caso particular de que el estado final esté en la región continua del espectro, sea $\rho(E_{fin})$ la densidad de estados del sistema no perturbado (i.e. el número de estados entre las energías E_{fin} y $E_{fin} + dE_{fin}$). La *tasa de transición total* queda definida por:

$$W_{if} = \int \Gamma_{if} \rho(E_{fin}) dE_{fin} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \phi_{fin} | \hat{V} | \phi_{inic} \rangle|^2 \rho(E_{inic}) \quad (1.6)$$

Esta expresión es conocida como regla de oro de Fermi (Fermi golden rule) (FGR) y será una de las bases para el estudio de las resonancias en este trabajo (Capítulo 6).

Diversas herramientas teóricas han sido desarrolladas y utilizadas para el estudio de esta área, la más destacable es el desarrollo del formalismo de la **mecánica cuántica no hermitiana** [Moi11] la cual se sustenta en la derivación de la transformación de **escaleo complejo** (complex scaling) propuesta por Balslev-Combes [BC71] y Simon [Sim73]. En este formalismo el hamiltoniano del sistema estudiado NO es hermitiano, con lo cual admite autovalores complejos. En particular, los estados resonantes poseen energías complejas [Gar17]:

$$E = E_r - i\frac{\Gamma}{2} \quad (1.7)$$

siendo $E_r > 0$ la *posición de la resonancia* y $\Gamma > 0$ es llamado el *ancho de la resonancia* el cual está relacionado con la tasa a la que se produce el decaimiento resonante y se vincula con el tiempo de vida de la resonancia mediante

$$\tau = \frac{\hbar}{\Gamma} \quad (1.8)$$

La condición de contorno para estas funciones de onda puede ser expresada como:

$$\phi_{reso}(x) \sim e^{ikr} = e^{i\alpha r} e^{\beta r} \quad (1.9)$$

donde, para los estados de resonancia, $k = \alpha - i\beta$ $\beta > 0$ [Gar17] con lo cual divergen asintóticamente (y por ende no pertenecen al espacio en el cual hamiltoniano es hermitiano). El escaleo complejo permite transformar estas funciones de onda en funciones de cuadrado integrables, como los estados ligados, permitiendo así cálculos de secciones eficaces y propiedades dinámicas controladas por los estados resonantes usando técnicas y algoritmos computacionales originalmente desarrollados en el formalismo estándar.

Por otro lado, dentro de la mecánica cuántica hermitiana, las posiciones y tiempos característicos de resonancias también pueden ser estudiados propagando temporalmente un paquete de ondas cuya energía esté centrada en el estado metaestable (métodos dependientes del tiempo); así como utilizando métodos independientes del tiempo como ser el estudio del tiempo de retraso [FT91] y los polos de la matriz de scattering, utilizando la densidad de estados del sistema [Moi98][KH04], mediante la Regla de Oro de Fermi (1.6), entre otros.

Tanto los métodos dependientes e independientes del tiempo han sido recientemente utilizados para computar tiempos de vida de resonancias en modelos de puntos cuánticos semiconductores [Ban+23] [SLB22] [GPO18].

En esta tesis se emplearán mayoritariamente métodos enmarcados en la mecánica cuántica hermitiana, tanto dependientes como independientes del tiempo (basados en la densidad de estados del sistema y en la regla de oro de Fermi) para estimar los tiempos de vida y posiciones de las resonancias de forma y Feshbach en sistemas de pozos cuánticos formados por capas de semiconductores. Éstos serán desarrollados en Capítulos 4, 5 y 6.

1.4. Objetivos

El objetivo general de este trabajo es caracterizar teórica y computacionalmente la dinámica electrónica en procesos de decaimiento por interacción coulombiana (ICD) en sistemas de pozos

cuánticos semiconductores y evaluar el impacto que la presencia de los estados de resonancia de forma pueda traer en la dinámica del proceso.

A tal fin, se establecen como objetivos específicos

- Proveer conocimiento relevante para el diseño y optimización de dispositivos optoelectrónicos basados en puntos cuánticos.
- Simular la evolución temporal del proceso ICD en el sistema de dos electrones mediante la técnica Multiconfigurational Time-Dependent Hartree (MCTDH).
- Estimar tiempos de decaimiento característicos del proceso ICD con técnicas dependientes e independientes del tiempo y comparar las predicciones obtenidas con resultados previos.
- Explorar la relación de las resonancias de forma de un sistema de un electrón con las resonancias Feshbach de un sistema de dos electrones.

Capítulo 2

Modelo para Dos QWs Semiconductores

En este trabajo estudiamos las propiedades dinámicas de las resonancias tipo ICD en el sistema estudiado en [Gol+15]. Éste consiste en un modelo de masa efectiva que describe dos electrones interactuando entre sí dentro de una nanoestructura de QWs construida a partir del apilamiento de capas de materiales semiconductores: $\text{In}_{0,53}\text{Ga}_{0,47}\text{As}$ y $\text{In}_{0,52}\text{Al}_{0,48}\text{As}$ emparejadas en la red (lattice-matched) de InP. El InGaAs posee un gap semiconductor de $E_g = 0,74\text{ eV}$, mientras que el de InAlAs es de $E_g = 1,45\text{ eV}$. Cuando una capa del primero es confinada entre dos capas del segundo, la diferencia de gaps produce un pozo efectivo de potencial en la dirección de apilamiento de las capas, en la que los electrones en la banda de conducción pueden ser confinados. Esto se describe esquemáticamente en la Fig. 2.1

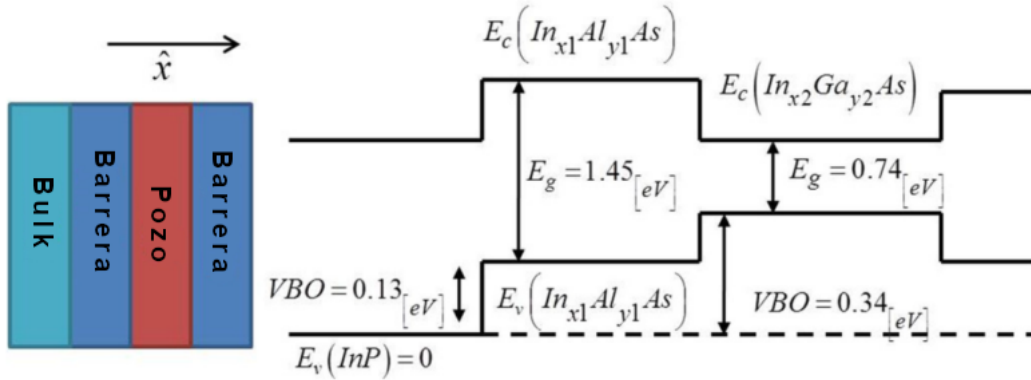


Figura 2.1: Esquema del potencial de confinamiento de los electrones y huecos a partir de los gaps energéticos de las bandas de los diferentes materiales en una nano-heteroestructura semiconductor. La dirección de apilamiento de las capas de materiales es llamada “ x ”, convención que será mantenida a lo largo de todo el el trabajo. Los materiales empleados en esta tesis fueron $\text{In}_{x_2=0,53}\text{Ga}_{y_2=0,47}\text{As}$ para el pozo de potencial e $\text{In}_{x_1=0,52}\text{Al}_{y_1=0,48}\text{As}$ para la barrera. Imagen extraída de [Gol+15].

El avance de las técnicas experimentales [JWH98] ha hecho posible crear nano-heteroestructuras de las dimensiones espaciales que se requieran, por ello se optó por mantener constantes los anchos de los pozos de potencial (ver Fig. 2.2):

- $w_L = 53,96 \text{ \AA}$
- $w_R = 20,05 \text{ \AA}$

y solamente será modificada la distancia entre los pozos, denotada por “ d ”. La profundidad de los pozos de potencial puede ser calculada a partir de las energías mostradas en Fig 2.1 y permanece constante, $V_0 = 500meV$.

El modelado de puntos cuánticos en semiconductores puede ser realizado con potenciales efectivos que representen la estructura de bandas a lo largo de la coordenada de crecimiento. En algunos casos, como los puntos cuánticos definidos por potenciales electrostáticos en un nanohilo [PBC16] [Sal+10], es más adecuado simular los QWs con potenciales analíticos, ya que en esos casos no hay cambio en la masa efectiva del electrón. Por otro lado, en el presente estudio es más adecuado recurrir a un modelo unidimensional con potenciales a trozos en el que hay un cambio simultáneo de la masa efectiva y del potencial en las interfases entre semiconductores.

A pesar de que en QWs los electrones pueden moverse libremente en dos dimensiones, cuando éstos son excitados al continuo, sobre las barreras de potencial de los QW, puede producirse transporte de carga en la dirección de crecimiento de las capas cuando un voltaje ad hoc es aplicado al sistema, por lo tanto el fenómeno de ICD es posible en este tipo de sistemas [Jah+20]. Además, si la separación entre los pozos es grande, se ha encontrado que la emisión electrónica en ICD ocurre sobre todo en la dirección de crecimiento de las capas de materiales [Gol+16]. Por lo tanto, consideramos un modelo de un hamiltoniano efectivo unidimensional para el ICD.

Además, se tomaron en cuenta las diferentes movilidades electrónicas en cada material [AM21][Yeo+20] introduciendo una masa efectiva variable con la posición. La Fig. 2.2 representa esquemáticamente los potenciales efectivos de los QW. Para los materiales usados en el presente trabajo las masas efectivas son [VMR01] [AK91]:

$$m^*(x) = \begin{cases} m_{well}^* = 0,045m_e & , \text{ si } x \in [x_1, x_2] \cup [x_3, x_4] \\ m_{barr}^* = 0,075m_e & , \text{ si } x \notin [x_1, x_2] \cup [x_3, x_4] \end{cases} \quad (2.1)$$

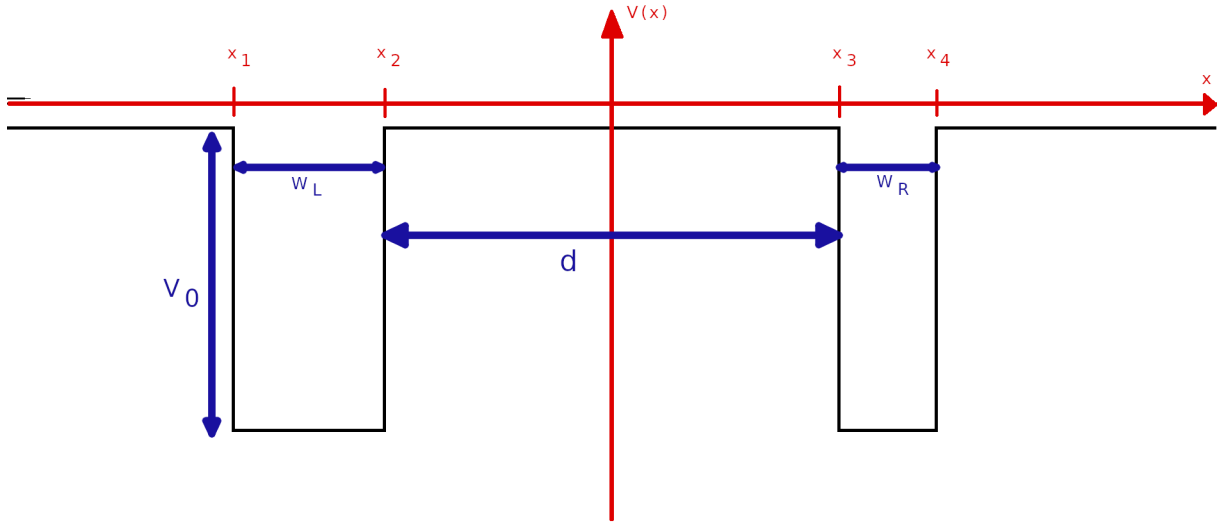


Figura 2.2: Representación esquemática del modelo de pozos cuadrados de potencial efectivo del QW. Se indican las cantidades representativas del sistema: profundidad de potencial V_0 , anchos de los pozos w_L y w_R y separación inter-pozo d . Se elige el sistema de coordenadas tal que los extremos de los pozos están en las posiciones x_i , $i = 1, 2, 3, 4$ con $x_2 = -x_3$

2.1. Hamiltonianos de Una y Dos Partículas

En muchos trabajos generalmente se asume, como primera aproximación, una expresión para la energía cinética de los electrones en la banda de conducción de la forma

$$\hat{T} = \frac{\hat{P}^2}{2m^*} \quad (2.2)$$

siendo m^* una masa efectiva promedio para los electrones que es constante en todo el espacio. Al contemplar el cambio en la masa efectiva en cada material $m^*(x)$, el operador de (2.2) pierde su propiedad de hermiticidad, con lo cual es recomendable redefinir el operador energía cinética como [Har05]:

$$\hat{T} = \frac{1}{2} \hat{P} \frac{1}{m^*(\hat{x})} \hat{P} \quad (2.3)$$

Es directo demostrar la hermiticidad de este operador: sean χ y ξ funciones de cuadrado integrable (como aquellas que serán utilizadas en el capítulos posteriores), queremos ver que $\langle \chi | \hat{T} \xi \rangle = \langle \hat{T} \chi | \xi \rangle$

$$\begin{aligned} \langle \chi | \hat{T} \xi \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \chi(x)^* \frac{1}{2} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \left[\frac{1}{m^*(x)} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \right] \xi(x) dx \\ &= \frac{(-i\hbar)^2}{2} \left(\left[\chi(x)^* \frac{1}{m^*(x)} \frac{d\xi}{dx}(x) \right] \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\chi^*}{dx}(x) \frac{1}{m^*(x)} \frac{d\xi}{dx}(x) dx \right) \\ &= -\frac{(-i\hbar)^2}{2} \left(\left[\xi(x) \frac{1}{m^*(x)} \frac{d\chi^*}{dx}(x) \right] \Big|_{-\infty}^{\infty} - \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m^*(x)} \frac{d\chi^*}{dx}(x) \right) \right] \xi(x) dx \right) \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \left[\frac{1}{m^*(x)} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \chi(x) \right]^* \xi(x) dx \\ &= \langle \hat{T} \chi | \xi \rangle. \end{aligned}$$

■ Hamiltoniano de Una Partícula

Para el caso en el que se tiene sólo una partícula en la red cristalina de la heteroestructura, el potencial efectivo bajo el que ésta se encuentra es (cf. Fig 2.2):

$$\begin{aligned} \hat{V}(x) = -V_0 \left[\Theta \left(x - \underbrace{\left(-w_R - d/2 \right)}_{x_1} \right) \Theta \left(-x + \underbrace{\left(-d/2 \right)}_{x_2} \right) + \right. \\ \left. + \Theta \left(x - \underbrace{\left(d/2 \right)}_{x_3} \right) \Theta \left(-x + \underbrace{\left(w_L + d/2 \right)}_{x_4} \right) \right] \quad (2.4) \end{aligned}$$

siendo Θ la función escalón de Heaviside.

Con estas definiciones de (2.3) y (2.4), denotamos el hamiltoniano de un único electrón en la estructura:

$$\hat{h}(x_1) = \hat{T}(x_1) + \hat{V}(x_1) \quad (2.5)$$

- Hamiltoniano de dos partículas

Cuando se introducen dos electrones al sistema, es necesario considerar una interacción electrostática entre ambos. Por *simplicidad* se ha considerado que ambos materiales semiconductores poseen una constante dieléctrica:

$$\varepsilon_r \approx 10\varepsilon_0 \quad (2.6)$$

Los valores tomados para ε_r que pueden ser obtenidos a partir de los reportes en la literatura [Web18] [AK91] [Bha06]; para cada material presentan poca discrepancia con (2.6) ¹

Bajo esta suposición, la interacción es la repulsión coulombiana entre dos partículas en un medio dieléctricamente homogéneo

$$V_{coul}(x_1, x_2) = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_r} \frac{1}{|x_1 - x_2|} \quad (2.7)$$

Si bien no trataremos el caso en que las permitividades eléctricas cambien de un material a otro en este trabajo, podemos mencionar que, al considerar diferentes propiedades dieléctricas en la heteroestructura, el potencial de interacción electrostática entre las cargas en los diferentes materiales puede ser deducido a partir de la *ecuación de Poisson*; un ejemplo de esto es tratado en [PS15].

Entonces, denotamos el hamiltoniano del sistema de dos electrones como \hat{H} , definido por:

$$\hat{H}(x_1, x_2) = \hat{h}(x_1) + \hat{h}(x_2) + \hat{V}_{coul}(x_1, x_2) \quad (2.8)$$

2.2. Adimensionalización del Hamiltoniano

Cuando se realizan cálculos numéricos resulta conveniente reescalar el sistema para trabajar en un conjunto de unidades “naturales” del mismo. Dada la analogía de los puntos cuánticos como átomos artificiales, definimos un radio de Bohr efectivo para los QD

$$a_0^* = 4\pi\varepsilon_r \frac{\hbar^2}{m_{well}^* e^2} = 117,5949\text{Å} \quad (2.9)$$

a partir de esta definición introducimos las variables adimensionales definidas según $x = a_0^*y$. Este cambio de variable permite reducir las ecuaciones de Schrödinger con las que trabajamos a sus formas adimensionalizadas.

- Ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (TISE) para una sola partícula

$$\hat{h}(x)\psi(x) = E\psi(x)$$

$$\begin{aligned} \left[\left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) \frac{1}{2m^*(x)} \left(-i\hbar \frac{d}{dx} \right) + V(x) \right] \psi(x) &= E\psi(x) \\ \left(\frac{\hbar^2}{m_{well}^* (a_0^*)^2} \right) \left[\left(\frac{d}{dy} \right) \frac{-1}{2m^*(x)/m_{well}^*} \left(\frac{d}{dy} \right) + \tilde{V}(y) \right] \psi(y) &= E\psi(y) \\ \left[\left(\frac{d}{dy} \right) \frac{-1}{2\tilde{m}^*(y)} \left(\frac{d}{dy} \right) + \tilde{V}(y) \right] \psi(y) &= \tilde{\varepsilon}\psi(y) \end{aligned}$$

¹Las permitividades de las aleaciones $A_{1-x}B_x$ generalmente son interpoladas a partir de aquellas correspondientes a los materiales básicos a partir de la fórmula cuadrática

$$\varepsilon_r^{AB} = (1-x)\varepsilon_r^A + x\varepsilon_r^B + x(1-x)C_\varepsilon$$

donde C_ε es conocido como “parámetro de bowing”. Para los materiales empleados $C_\varepsilon = -1,0$

$$\implies \hat{h}(y)\psi(y) = \tilde{\varepsilon}\psi(y)$$

donde se han introducido las siguientes cantidades adimensionales

$$\tilde{m}^*(y) = \begin{cases} 1 & , \text{ si } y \in [y_1, y_2] \cup [y_3, y_4] \\ m_{barr}^*/m_{well}^* = 1,6667 & , \text{ si } y \notin [y_1, y_2] \cup [y_3, y_4] \end{cases},$$

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{m_{well}^*(a_0^*)^2}{\hbar^2} E = \frac{E}{0,01225 \text{ eV}},$$

$$\tilde{V}(y) = \frac{m_{well}^*(a_0^*)^2}{\hbar^2} V(x(y)) = \frac{V(x(y))}{0,01225 \text{ eV}}.$$

Hemos usado la definición $y_i = x_i/a_0^*$ para indicar las coordenadas del borde de los pozos en el nuevo sistema de unidades (cf. Fig. 2.2).

En estas nuevas unidades, los parámetros de los pozos de potencial son:

- $\tilde{w}_L = 0,45886$
- $\tilde{w}_R = 0,1705$
- $\tilde{d} = d/a_0^*$
- $\tilde{V}_0 = 40,81663$

- Ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (TDSE) para una sola partícula

En forma análoga, se definen también una variable adimensional para el tiempo de evolución de un sistema bajo este hamiltoniano según $t = \lambda \tilde{t}$

$$\implies i\hbar \frac{d}{dt} \psi(x, t) = \hat{h}(x)\psi(x, t)$$

$$\begin{aligned} i \frac{\hbar}{\lambda} \frac{d}{d\tilde{t}} \psi(x(y), t(\tilde{t})) &= \left(\frac{\hbar^2}{m_{well}^*(a_0^*)^2} \right) \hat{h}(y)\psi(x(y), t(\tilde{t})) \\ i \frac{d}{d\tilde{t}} \psi(x(y), t(\tilde{t})) &= \lambda \left(\frac{\hbar}{m_{well}^*(a_0^*)^2} \right) \hat{h}(y)\psi(x(y), t(\tilde{t})) \end{aligned} \quad (2.10)$$

Definiendo entonces

$$\lambda = \frac{m_{well}^*(a_0^*)^2}{\hbar} = 5,37530 \times 10^{-14} \text{ s} \quad (2.11)$$

(2.10) se reduce a la forma habitual de la TDSE, lo que significa que λ es un tiempo característico de la evolución temporal de este sistema (no se debe confundir este con el tiempo característico del decaimiento de las resonancias τ , presentado en Sec. 1.3).

- TISE y TDSE para sistema de dos partículas

Los casos de la TISE y TDSE para dos partículas, son completamente análogos a los desarrollados para una partícula. Para la TISE tenemos:

$$\hat{H}(x_1, x_2)\Psi(x_1, x_2) = \left[\hat{h}(x_1) + \hat{h}(x_2) + \hat{V}_{coul}(x_1, x_2) \right] \Psi(x_1, x_2) = E\Psi(x_1, x_2)$$

Luego haciendo los cambios de variable $y_i = x_i/a_0^*$ y $t = \lambda\tilde{t}$, se obtiene

$$\hat{H}(y_1, y_2)\Psi(y_1, y_2) = \left[\hat{h}(y_1) + \hat{h}(y_2) + \hat{V}_{coul}(y_1, y_2) \right] \Psi(y_1, y_2) = \varepsilon\Psi(y_1, y_2) \quad (2.12)$$

con la definición,

$$\hat{V}_{coul}(y_1, y_2) = \left(\frac{\hbar^2}{m_{well}^*(a_0^*)^2} \right)^{-1} \hat{V}_{coul}(x_1(y_1), x_2(y_2)) = \frac{1}{|y_1 - y_2|} \quad (2.13)$$

2.3. Sobre la Aplicación Numérica de la Interacción Coulombiana

Trabajar numéricamente con potenciales coulombianos como el propuesto en (2.7) o su versión adimensionalizada de la (2.13), requiere tener ciertos recaudos debido a las divergencias de los mismos. Es por ello que en la práctica suelen utilizarse otras alternativas que reflejen el comportamiento del potencial (2.13) en las regiones de interés, pero que no exhiban divergencias como tal.

Diversos Potenciales son propuestos en la literatura (véase [BGC11] y [Gol+15]), el empleado en este trabajo es:

$$\hat{V}_{int}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{(a(x_1 - x_2) + c)^2 + d}} \quad (2.14)$$

Los parámetros a, c, d son elegidos de forma tal que, en las regiones de interés (aproximadamente las distancias inter-QW), el error en la aproximación sea pequeño como se ve en la Fig. 2.3. Los parámetros empleados son:

$$a = 1,0 \quad c = 0,0 \quad d = 0,0001$$

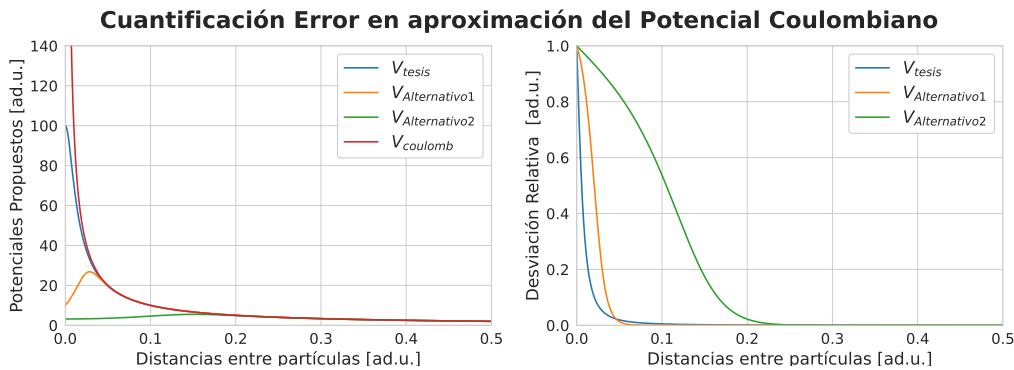


Figura 2.3: **Panel izquierdo:** Gráficas de diferentes potenciales propuestos como alternativas al potencial coulombiano entre los electrones, se asume que la posición de uno de ellos es $x = 0$ por simplicidad. En azul se presenta el potencial empleado en este trabajo, dado en (2.14) con los parámetros $a = 1,0$ $c = 0,0$ $d = 0,0001$. Los potenciales $V_{alternativo1}$ y $V_{alternativo2}$ corresponden a otras propuestas empleadas en [BGC11] y [Gol+15] respectivamente. **Panel derecho:** desviación relativa $|V_{alternativo} - V_{coulomb}|/V_{coulomb}$ de cada una de las propuestas mencionadas.

En el panel derecho de la Fig. 2.3 se grafica la desviación de la aproximación respecto al potencial de Coulomb de las diferentes aproximaciones. Es decir, el potencial unidimensional efectivo difiere del potencial real en tres dimensiones porque justamente asume que el sistema real no es verdaderamente unidimensional, sino que tiene otros grados de libertad que atenúan la divergencia en el caso de contacto entre las partículas [Bed+03].

Capítulo 3

Representación en Variable Discreta

En este capítulo se busca encontrar soluciones a la ecuación de Schrödinger, tanto en su versión dependiente del tiempo como en la independiente, para ello existe una amplia variedad de métodos disponibles. En términos generales, pueden distinguirse dos grupos: los métodos *espectrales* y los métodos *de grilla* [Han17].

Los primeros consisten en proponer una expansión de la función de onda en un conjunto finito de funciones, usualmente ortonormales: $\{\phi_j(x)\}_{j=1}^n$

$$\psi(x, t) = \sum_{j=1}^n C_j(t) \phi_j(x).$$

En estos métodos el problema se reduce a resolver un sistema de ecuaciones diferenciales de primer orden para los coeficientes C_j en el caso de la TDSE y un sistema de autovalores algebraico en el caso de la TISE. La principal dificultad que afecta a estos métodos es el cálculo de los elementos de matriz de la energía potencial

$$\langle \phi_j | \hat{V} | \phi_k \rangle = \int \phi_j^*(x) V(x) \phi_k(x) dx \quad (3.1)$$

que en ocasiones puede volverse complicado y más costoso que la diagonalización del hamiltoniano. Entre los ejemplos de este tipo de método podemos destacar el ampliamente estudiado método variacional [Sha14].

Por su parte, los métodos de grilla consisten en definir un conjunto de puntos en las coordenadas espaciales $\{x_\alpha\}_{\alpha=1}^n$ y representar la función de onda por su valor en estos puntos

$$\psi(x) \longrightarrow (\psi(x_1), \dots, \psi(x_n))^T = \vec{\psi}$$

Entre éstos, podemos destacar el método de diferencias finitas; la ventaja que ofrecen estos métodos es que los cálculos de integrales son realizados por cuadraturas, por ejemplo

$$\langle \phi_j | \hat{V} | \phi_k \rangle = \sum_{\alpha=1}^N \phi_j(x_\alpha)^* V(x_\alpha) \phi_k(x_\alpha)$$

Esta clase de métodos suelen ser menos precisos que los espectrales, lo que requiere trabajar con un grillado de puntos muy denso para obtener resultados aceptables, elevando el costo computacional.

En un punto medio entre ambas clases, encontramos un método pseudo-espectral conocido como **representación en variable discreta (discrete variable representation) (DVR)** que combina ventajas de ambas categorías. En este capítulo se pretende desarrollar las bases teóricas que lo fundamentan así como la implementación del mismo utilizada en este trabajo.

3.1. Representaciones FBR y DVR

Para ilustrar estos métodos consideremos un problema unidimensional de una sola partícula, sea $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ el hamiltoniano del sistema, y un potencial que sea función sólo de las variables espaciales.

Como en los métodos espectrales, tomamos una base de funciones de cuadrado integrable $\{\phi_j(x)\}_{j=1}^{\infty}$ ortonormales y además supondremos que $x\phi_j(x)$ y $\phi_j'(x)$ son de cuadrado integrable. Estas funciones son llamadas frecuentemente **base primitiva** de la representación.

Por último, asumimos que podemos calcular **analíticamente** los elementos de matriz

$$\mathbb{Q}_{jk} = \langle \phi_j | \hat{X} | \phi_k \rangle \quad \mathbb{D}_{jk}^{(2)} = \langle \phi_j | d^2/dx^2 | \phi_k \rangle \quad (3.2)$$

La resolución numérica de la ecuación de Schrödinger requiere trabajar con un subespacio expandido por un subconjunto FINITO de la base antes mencionada, por lo tanto introducimos el operador proyección

$$\hat{\mathcal{P}} = \sum_{j=1}^n |\phi_j\rangle \langle \phi_j|$$

Bajo estas condiciones, las representaciones matriciales del operador posición y del operador energía cinética habitual (\mathbb{T}^{FBR}) son conocidas exactamente.

Harris, Engerholm y Gwinn [HEG65] propusieron un método que consiste en considerar al operador potencial como una función del operador posición $\hat{V} = V(\hat{X})$. En éste, conocido como **representación en base finita (finite basis-set representation) (FBR)** la representación matricial del potencial se reduce a

$$\mathbb{V}^{FBR} = V(\mathbb{Q}) \quad (3.3)$$

siendo \mathbb{Q} la matriz $n \times n$ cuyos elementos están dados por (3.2). En la práctica, estos elementos son calculados mediante diagonalización de la matriz \mathbb{Q} .

$$\mathbb{Q} = \mathbb{U}\mathbb{X}\mathbb{U}^\dagger \quad (3.4)$$

siendo \mathbb{U} la matriz de cambio de base unitaria, y $\mathbb{X} = \text{diag}(x_1, \dots, x_n)$ con $x_\alpha, \alpha = 1, \dots, n$ los autovalores de \hat{X} en esta representación.

Para ejemplificar ésto, supongamos que el potencial admite una expansión en serie de potencias

$$\begin{aligned} \mathbb{V}^{FBR} &= V(\mathbb{Q}) \\ &= V(\mathbb{U}\mathbb{X}\mathbb{U}^\dagger) \\ &= \sum_{m=0}^n a_m (\mathbb{U}\mathbb{X}\mathbb{U}^\dagger)^m \\ &= \mathbb{U} \left(\sum_{m=0}^n a_m \mathbb{X}^m \right) \mathbb{U}^\dagger \\ &= \mathbb{U}\mathbb{V}(\mathbb{X})\mathbb{U}^\dagger \end{aligned}$$

donde se ha usado que $\mathbb{U}\mathbb{U}^\dagger = \mathbb{I}$.

Aquí comienza a vislumbrarse la utilidad de esta aproximación: eligiendo un conjunto de autofunciones conveniente, la matriz de cambio de base muchas veces puede ser obtenida en forma analítica, con lo cual el problema de calcular los elementos de matriz de (3.1) se reduce a una multiplicación de matrices

$$\begin{aligned}
[\mathbb{V}^{FBR}]_{jk} &= \sum_{\alpha,\beta} \mathbb{U}_{j\alpha} [V(\mathbb{X})]_{\alpha\beta} \mathbb{U}_{\beta k}^\dagger \\
&= \sum_{\alpha,\beta} \mathbb{U}_{j\alpha} V(x_\alpha) \delta_{\alpha\beta} \mathbb{U}_{\beta k}^\dagger \\
&= \sum_{\alpha} \mathbb{U}_{j\alpha} V(x_\alpha) \mathbb{U}_{\alpha k}^\dagger \\
&= \sum_{\alpha} \mathbb{U}_{j\alpha} V(x_\alpha) \mathbb{U}_{k\alpha}^*
\end{aligned} \tag{3.5}$$

Se ha demostrado ([DC68]) que, cuando la base elegida $\{\phi_j\}$ consiste de polinomios ortogonales, la aproximación FBR es equivalente a aproximar las integrales de los métodos espectrales por cuadraturas gaussianas, siendo los puntos de la cuadratura los autovalores de \mathbb{X} en (3.4).

$$[\mathbb{V}^{Quad}]_{jk} = \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \phi_j^*(x_\alpha) V(x_\alpha) \phi_k(x_\alpha) \tag{3.6}$$

Esta equivalencia y la comparación entre las (3.5) y (3.6) permite identificar,

- A los autovalores x_α obtenidos con “puntos de una grilla”, usados para representar la función de onda,
- Y a los pesos de cuadratura gaussiana asociada a la representación: $\sqrt{w_\alpha} = \mathbb{U}_{k\alpha}^* / \phi_k(x_\alpha)$ para cualquier $k = 1, \dots, n$.

Como consecuencia de este resultado se desprenden algunas propiedades útiles que satisface la base primitiva, entre las cuales podemos destacar la ortogonalidad discreta:

$$\langle \phi_j | \phi_k \rangle = \sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \phi_j^*(x_\alpha) \phi_k(x_\alpha) = \delta_{jk} \tag{3.7}$$

Un punto importante a notar es que al utilizar aproximación FBR, se pierde la validez del Principio Variacional [AM21], con lo cual las autoenergías obtenidas NO son necesariamente cotas superiores de las verdaderas. Ésto trae consigo implicaciones importantes como veremos posteriormente.

3.2. Representación Variable Discreta DVR

Tomando como base el método FBR, la matriz de cambio de base \mathbb{U} permite introducir un nuevo paso conceptual, la transformación de FBR a DVR:

Definimos las **funciones DVR**

$$\chi_\alpha(x) = \sum_{j=1}^n \mathbb{U}_{j\alpha} \phi_j(x) \tag{3.8}$$

como nueva base de autofunciones, las cuales por construcción son ortonormales (si las ϕ_j lo eran) y diagonalizan la representación matricial del operador \hat{X} en el subespacio considerado, por lo tanto

- $\langle \chi_\alpha | \chi_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta}$
- $\langle \chi_\alpha | \hat{X} | \chi_\beta \rangle = x_\alpha \delta_{\alpha\beta}$

Entonces, la representación matricial del Hamiltoniano es:

$$\mathbb{H}^{DVR} = \mathbb{T}^{DVR} + \mathbb{V}^{DVR} \quad (3.9)$$

$$\mathbb{T}^{DVR} = \mathbb{U}^\dagger \mathbb{T}^{FBR} \mathbb{U} \quad (3.10)$$

$$\mathbb{V}^{DVR} = \mathbb{U}^\dagger \mathbb{V}^{FBR} \mathbb{U} \implies [\mathbb{V}^{DVR}]_{\alpha\beta} = V(x_\alpha) \delta_{\alpha\beta} \quad (3.11)$$

A su vez, si la base primitiva FBR de partida permite la asociación con un método de cuadratura gaussiana, decimos que tenemos una **DVR exacta**. De esta forma, este método combina la mejor precisión de los métodos espectrales en el cálculo de las representaciones matriciales de la energía cinética, con la sencillez del cálculo de los elementos de matriz del potencial que ofrecen las aproximaciones por cuadratura de los métodos de grilla.

Para una DVR exacta, tenemos propiedades útiles de las funciones DVR involucradas

- Ortonormalidad discreta

$$\sum_{\alpha=1}^n w_\alpha \phi_j^*(x_\alpha) \phi_k(x_\alpha) = \delta_{jk}$$

- Completitud discreta

$$\sum_{j=1}^n \sqrt{w_\alpha w_\beta} \phi_j^*(x_\alpha) \phi_j(x_\beta) = \delta_{\alpha\beta}$$

- Propiedad- δ discreta

$$\chi_\alpha(x_\beta) = \sqrt{w_\alpha}^{-1} \delta_{\alpha\beta}$$

Esta última propiedad permite ejemplificar claramente el vínculo que la DVR exacta establece entre los métodos espectrales y de grilla: si $\psi \in \text{span}\{\chi_\alpha\}$ entonces como las funciones DVR son base, tenemos

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \sum_{\beta=1}^n \underbrace{\langle \chi_\beta | \psi \rangle}_{=C_\beta} \chi_\beta(x) \\ \implies \psi(x_\alpha) &= \sum_{\beta=1}^n \langle \chi_\beta | \psi \rangle \underbrace{\chi_\beta(x_\alpha)}_{=\sqrt{w_\alpha}^{-1} \delta_{\alpha\beta}} = \sqrt{w_\alpha}^{-1} \langle \chi_\alpha | \psi \rangle \\ &\implies \boxed{C_\alpha = \langle \chi_\alpha | \psi \rangle = \sqrt{w_\alpha} \psi(x_\alpha)} \end{aligned} \quad (3.12)$$

Es decir, los valores de las componentes de los autovectores de la matriz \mathbb{H}^{DVR} son, salvo por el peso w_α , los valores de la función de onda en los puntos de la grilla.

3.3. Adaptación Representación DVR-Seno

En este trabajo se desarrolló una versión adaptada del método DVR-Seno utilizado habitualmente en la literatura [Bec00], el cual es tomado como base. El punto de partida de éste es la elección de una base primitiva de autofunciones de una caja de potencial cuadrada y de longitud L .

$$\phi_j(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{2\pi(x-x_0)}{L}\right) & , \text{ si } x \in [x_0, x_0 + L] \\ 0 & , \text{ si } x \notin [x_0, x_0 + L]. \end{cases} \quad (3.13)$$

Tratándose de una DVR exacta, están relacionadas con los polinomios de Chebyshev [AS13]. En este método, los puntos de grilla x_α , $\alpha = 1, \dots, N$, los pesos de cuadratura w_α y los elementos de la matriz de cambio de base $\mathbb{U}_{j\alpha}$ están dados por

$$x_\alpha = x_0 + \alpha\Delta x = x_0 + \alpha\frac{L}{N+1} \quad , \quad w_\alpha = \sqrt{\Delta x} \quad (3.14)$$

$$\mathbb{U}_{j\alpha} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin\left(\frac{j\alpha\pi}{N+1}\right) \quad (3.15)$$

Con ésto, estamos en condiciones de calcular los elementos de matriz $[\mathbb{T}^{FBR}]_{jk}$ con la definición del operador de energía cinética antes dada (c.f. (2.3)), utilizando la base primitiva (3.13)

$$\begin{aligned} [\mathbb{T}^{FBR}]_{jk} &= \langle \phi_j | \hat{T} | \phi_k \rangle = \int_{x_0}^{x_0+L} \phi_j(x) \left[\frac{1}{2}(-i\hbar) \frac{d}{dx} \left(\frac{-i\hbar}{m^*(x)} \frac{d\phi_k}{dx}(x) \right) \right] dx \\ &= -\frac{(-i\hbar)^2}{2} \int_{x_0}^{x_0+L} \frac{d\phi_j^*}{dx} \frac{1}{m^*(x)} \frac{d\phi_k^*}{dx} dx + \underbrace{\left[\phi_j^*(x) \frac{1}{m^*(x)} \frac{d\phi_k}{dx}(x) \right]_{x_0}^{x_0+L}}_{=0} \\ &\stackrel{(3.13)}{=} \frac{\hbar^2}{L} \frac{j\pi}{L} \frac{k\pi}{L} \int_{x_0}^{x_0+L} \frac{1}{m^*(x)} \cos\left(\frac{j\pi}{L}(x-x_0)\right) \cos\left(\frac{k\pi}{L}(x-x_0)\right) dx \end{aligned}$$

Realizando el cambio de variable $y = \pi(x-x_0)/L$ y denotando por $y^{(l)}$, $l = 1, \dots, N = 4$ las nuevas coordenadas correspondientes a las discontinuidades de la masa efectiva (Fig. 2.2), con $y^{(0)} = 0$ $y^{(N+1)} = \pi$, podemos escribir la expresión anterior como

$$[\mathbb{T}^{FBR}]_{jk} = \frac{\hbar^2 jk}{\pi L^2} \sum_{l=1}^{N+1} (m_l^*)^{-1} \underbrace{\int_{y_{l-1}}^{y_l} \cos(jy) \cos(ky) dy}_{I(y_{l-1}, y_l; j, k)} \quad (3.16)$$

donde las masas efectivas $m_l^* = m_{well}, m_{barrier}$ si l es impar o par respectivamente.

Las integrales $I(a, b; j, k)$ pueden calcularse directamente, obteniendo:

- Caso 1 : $j = k$

$$I(a, b; j, j) = \frac{b-a}{2} + \frac{\sin(2jb) - \sin(2ja)}{4j} \quad (3.17)$$

- Caso 2 : $j \neq k$

$$I(a, b; j, k) = \frac{\left[k \cos(jx) \sin(kx) - j \sin(jx) \cos(kx) \right] \Big|_{x=a}^{x=b}}{k^2 - j^2} \quad (3.18)$$

Finalmente, utilizando (3.16) y (3.10) obtenemos los elementos de matriz de energía cinética en la representación DVR.

3.4. Optimización de Parámetros DVR-Seno Adaptada

El método desarrollado en la sección anterior contiene dos parámetros de la base primitiva (3.13) que deben ser optimizados para obtener resultados adecuados para su implementación: el tamaño de la base N y de la caja L .

3.4.1. Ajuste del Ancho de Caja de Potencial

Las técnicas de análisis independientes del tiempo empleadas en este trabajo se basan, como veremos luego, en estudiar la densidad de estados. Como trabajamos en regiones del espectro continuo, se debe asegurar que la discretización del espectro sea lo suficientemente densa para obtener resultados adecuados.

Para una caja de potencial DVR suficientemente larga podemos estimar la separación de los niveles energéticos usando los niveles de la caja de potencial:

$$\begin{aligned} \Delta E^{(n)} &= \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \left((n+1)^2 - n^2 \right) \\ &= \frac{\hbar^2 \pi^2 (2n+1)}{2mL^2} \\ &\sim \frac{1}{L^2} \end{aligned}$$

como se muestra en Fig. 3.1.

Desviaciones respecto de esta estimación general son el objeto de estudio del método de estabilización [BGC11], aunque no será tratado en este trabajo.

3.4.2. Ajuste del Tamaño de Base Elegida

Como se ha mencionado, las representaciones DVR y FBR no son variacionales y los autovaleores estimados no necesariamente son cotas superiores de los valores reales. El comportamiento de los estados ligados obtenidos para el hamiltoniano \hat{h} de una partícula en función del tamaño de base DVR-seno utilizada puede verse en la Fig. 3.2. Para garantizar una correcta representación de los estados involucrados y estimar las energías de forma correcta, se constataron las estimaciones de los estados ligados de los hamiltonianos de una partícula con aquellas realizadas mediante el método variacional. Éstas, así como los parámetros con los cuales fueron obtenidas se muestran en la Tabla 3.1.

Dependencia Espacial de las Autoestados con Tamaño de Caja de Potencial

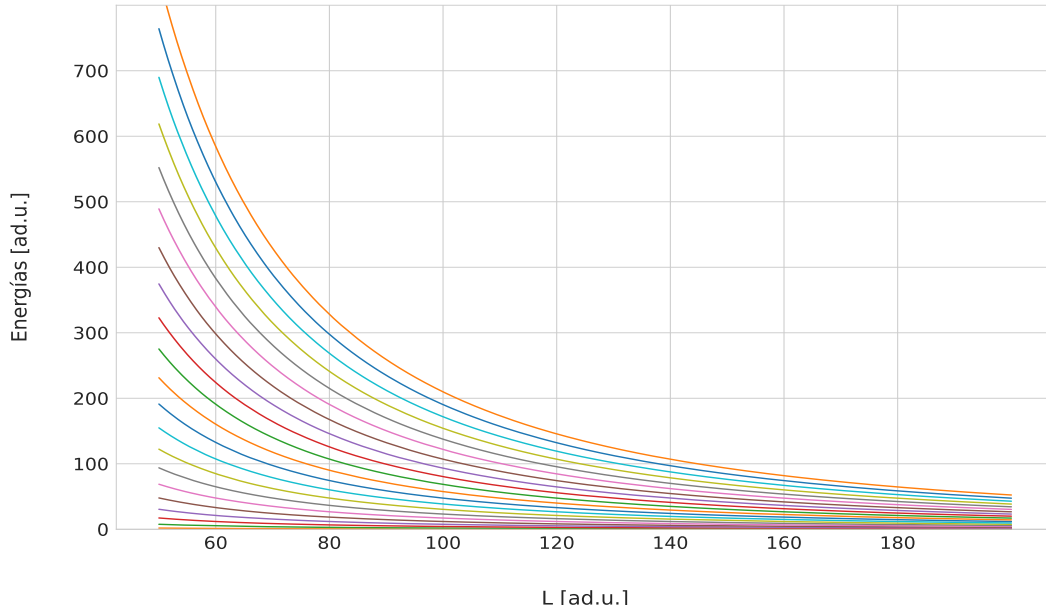


Figura 3.1: Separación entre los niveles energéticos del espectro pseudo-continuo del hamiltoniano de una sola partícula como función del tamaño de caja de potencial (L).

Energías de Estados Ligados del Sistema vs Tamaño de Base Empleada

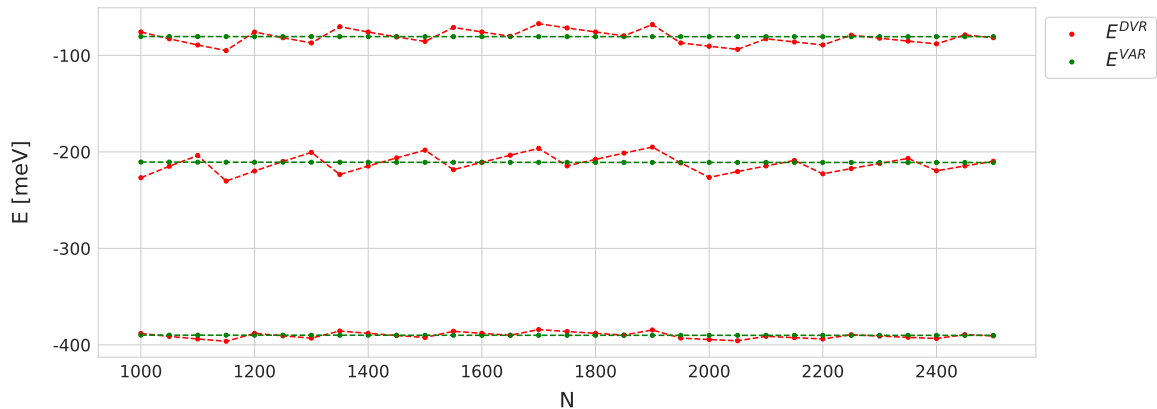


Figura 3.2: Comparativa de convergencia de autoenergías de los estados ligados del hamiltoniano de una sola partícula como función del tamaño de base N , manteniendo constante el tamaño de la caja de potencial ($L=50$ ad.u.). Nótese que las gráficas sugieren que la convergencia DVR requiere de un tamaño mucho mayor de la base primitiva; además, las estimaciones no son necesariamente cotas superiores.

Estimaciones estados ligados en [meV] N=12550 ; L=302,68		
Estado ligado	Método variacional	Método DVR
E_1	-389,7	-390,1
E_2	-210,1	-209,1
E_3	-80,3	-80,2

Tabla 3.1: Estimaciones variacional y DVR (parámetros óptimos) para los estados ligados del hamiltoniano de una partícula.

3.5. Condiciones de Empalme de BenDaniel-Duke

Al modelar un sistema con una masa efectiva que es una función discontinua de la posición, la función de onda debe satisfacer dos condiciones:

- Continuidad de la función de onda, como requisito estándar en mecánica cuántica.
- Condiciones de empalme de BenDaniel-Duke [BC17] para la derivada de la función de onda.

Las condiciones de empalme de BenDaniel-Duke están vinculadas a la continuidad de la densidad de corriente de probabilidad en la interface de materiales, podemos deducirlas a partir de la ecuación de Schrödinger del sistema. Sean x_i (o y_i recordando que se adimensionalizó el sistema, Sec. 2.2) las coordenadas en las cuales se tienen las discontinuidades de la masa efectiva

$$\begin{aligned}
& \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_i - \varepsilon}^{x_i + \varepsilon} \left[\frac{-\hbar^2}{2} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m(x)} \frac{d\psi}{dx}(x) \right) + (V(x) - E) \psi(x) \right] dx = 0 \\
& \xrightarrow{\text{cont. } \psi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{x_i - \varepsilon}^{x_i + \varepsilon} \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{m(x)} \frac{d\psi}{dx}(x) \right) dx = 0 \\
& \implies \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left[\frac{1}{m(x)} \frac{d\psi}{dx}(x) \Big|_{x_i - \varepsilon}^{x_i + \varepsilon} \right] = 0 \\
& \implies \boxed{\frac{1}{m(x_i^+)} \frac{d\psi}{dx}(x_i^+) = \frac{1}{m(x_i^-)} \frac{d\psi}{dx}(x_i^-) \quad \forall \text{ punto de discontinuidad}} \quad (3.19)
\end{aligned}$$

Como puede notarse, la derivada de la función de onda NO es una función continua. Es destacable que este comportamiento pueda reproducirse a partir de la representación DVR antes presentada. En la Fig. 3.3 se representa la función de onda de un estado de resonancia del sistema y su derivada. La magnitud de estas discontinuidades está en concordancia con las condiciones de empalme de (3.19), tal como se evidencia en la Tabla 3.2.

Discontinuidad Derivada Función de Onda

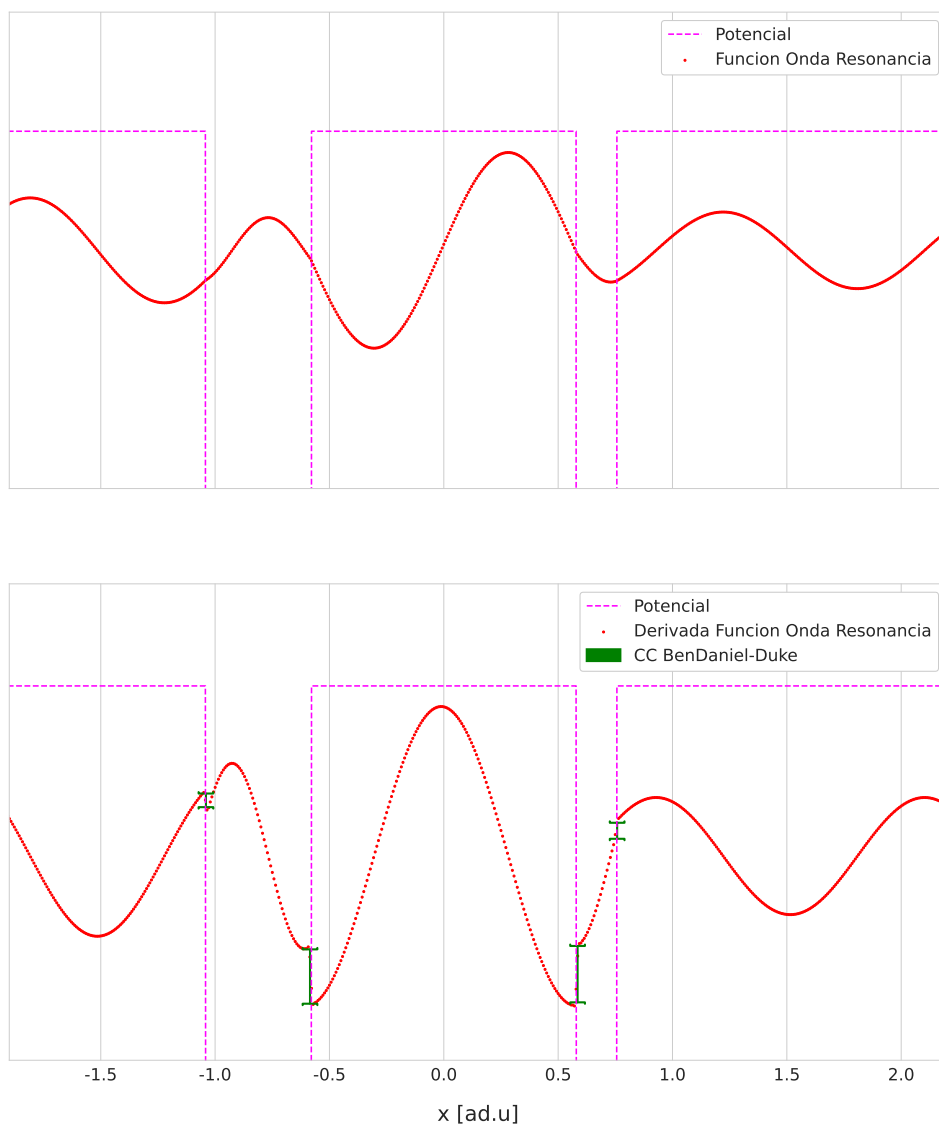


Figura 3.3: **Panel superior:** Función de onda de una resonancia de forma del sistema (cf. capítulo 5) junto con el perfil del potencial de pozos. **Panel inferior:** Derivada de la función de onda del panel superior, mostrando claramente las discontinuidades en los cambios de material predichas por la condición de BenDaniel-Duke.

Condiciones de Empalme	
Discontinuidad x_1	$\Psi(x_1^-)' / m(x_1^-) = 0,5604$ $\Psi(x_1^+) / m(x_1^+) = 0,577$
Discontinuidad x_2	$\Psi(x_2^-)' / m(x_2^-) = -1,309$ $\Psi(x_2^+) / m(x_2^+) = -1,306$
Discontinuidad x_3	$\Psi(x_3^-)' / m(x_3^-) = -1,307$ $\Psi(x_3^+) / m(x_3^+) = -1,2995$
Discontinuidad x_4	$\Psi(x_4^-)' / m(x_4^-) = 0,348$ $\Psi(x_4^+) / m(x_4^+) = 0,334$

Tabla 3.2: Condiciones de empalme (3.19) de BenDaniel-Duke en las discontinuidades de la masa efectiva para la función de onda presentada en Fig. 3.3

Capítulo 4

Técnicas de Evolución Temporal: MCTDH

La resolución de un problema por métodos dependientes del tiempo consta de tres etapas genéricas

1. Especificación de un ansatz de solución (consistente con la condición inicial $\Psi(t=0)$ del problema).
2. Propagación del estado inicial $\Psi(0) \rightarrow \Psi(t)$: resolución de ecuaciones de movimiento correspondientes para el método utilizado.
3. Análisis de observables a partir de la función de onda obtenida.

En la práctica, en lugar de resolver directamente la TDSE resulta conveniente recurrir a *principios variacionales dependientes del tiempo* que, se ha demostrado, son equivalentes a la primera. Se utilizó el principio variacional de Frenkel-Dirac (FDVP) [Raa00] que establece que las soluciones de la TDSE se obtienen de la ecuación variacional:

$$\left\langle \delta\psi \left| \hat{H} - i\frac{\partial}{\partial t} \right| \psi \right\rangle = 0 \quad (4.1)$$

En este capítulo se presentan las bases teóricas del método multiconfiguracional de Hartree dependiente del tiempo (MCTDH) [Han11], el cual es empleado en este trabajo, haciendo énfasis en las tres etapas antes mencionadas.

Como introducción a la resolución del problema de manera variacional, resulta conveniente la presentar de una versión simplificada del método antes mencionado: El método de Hartree dependiente del tiempo (TDH) [Goe+83].

4.1. Time-Dependent Hartree

1. Ansatz TDH

En TDH proponemos una expansión de la función de onda como producto de funciones que dependen de 1 grado de libertad del sistema

$$\Psi(q_1, \dots, q_f, t) = a(t) \varphi_1(q_1, t) \dots \varphi_f(q_f, t) = a(t) \Phi(t), \quad (4.2)$$

en donde la función $\Phi(t)$ es conocida como *producto de hartree* y las $\varphi_k(q_k, t) \quad \forall k = 1, \dots, f$ son llamadas *funciones de una sola partícula* (single particle functions, SPF) y las tomaremos *normalizadas*.

En la (4.2) las SPF no son únicas, dado que, por ejemplo,

$$\varphi_1 \cdot \varphi_2 = b \varphi_1 \cdot \frac{\varphi_2}{b}$$

dan como resultado la misma función de onda Ψ . El factor de redundancia $a(t)$ permite imponer una *restricción* que fije las fases. Suele tomarse:

$$i \langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_k(t) \rangle = g_k(t) \quad \forall k = 1, \dots, f \quad (4.3)$$

donde $g_k(t)$ es una función arbitraria a priori. Sin embargo, notemos que si pedimos la conservación de la norma de las SPF, tenemos que

$$\begin{aligned} 0 &= \frac{d}{dt} \langle \varphi_k(t) | \varphi_k(t) \rangle = \langle \dot{\varphi}_k(t) | \varphi_k(t) \rangle + \langle \varphi_k(t) | \dot{\varphi}_k(t) \rangle \\ &= (-i g_k(t))^* + -i g_k(t) \\ &= -2 \operatorname{Im}(g_k(t)) \end{aligned}$$

Luego, la conservación de la norma implica que las funciones $g_k(t)$ son *reales*.

2. Ecuaciones de movimiento TDH

A partir del ansatz propuesto en (4.2) es posible derivar ecuaciones de movimiento de TDH a partir del principio variacional (4.1). Resulta conveniente introducir las funciones $\Phi^{(k)}(t)$ que satisfacen las siguientes propiedades

$$\Phi^{(k)}(t) = \prod_{\nu \neq k} \varphi_\nu(q_\nu, t) \quad (4.4)$$

$$\Phi(t) = \Phi^{(k)}(t) \cdot \varphi_k(q_k, t) \quad (4.5)$$

Por simplicidad, se omitirá la dependencia temporal y espacial de las cantidades involucradas salvo que resulte necesario. Usando las relaciones recién definidas tenemos que:

$$\begin{aligned} 0 &= \left\langle \delta\psi \left| \hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right| \psi \right\rangle \\ &= \left(\delta a^* \langle \Phi | + a^* \sum_k \langle \Phi^{(k)} | \langle \delta\varphi_k | \right) \left(a \hat{H} | \Phi \rangle - i \dot{a} | \Phi \rangle - i a \sum_l | \Phi^{(l)} \rangle \langle \dot{\varphi}_l | \right) \\ &= \delta a^* \left(a \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle - i \dot{a} - i a \sum_l \langle \Phi^{(l)} | \Phi^{(l)} \rangle \langle \varphi_l | \dot{\varphi}_l \rangle \right) + \\ &\quad + a^* a \sum_k \langle \Phi^{(k)} \delta\varphi_k | \hat{H} | \Phi \rangle - i a^* \dot{a} \sum_k \langle \Phi^{(k)} \delta\varphi_k | \Phi \rangle - i a^* a \sum_{k,l} \langle \Phi^{(k)} \delta\varphi_k | \Phi^{(l)} \dot{\varphi}_l \rangle \end{aligned}$$

donde hemos hecho uso de (4.5).

Las variaciones δa^* y $\langle \delta\varphi_k | \quad \forall k$ son arbitrarias e independientes, con lo cual, cada renglón de la ecuación anterior debe anularse por separado, así obtenemos:

- Para las variaciones de δa^*

$$\begin{aligned} 0 &= a(t) \langle \Phi(t) | \hat{H} | \Phi(t) \rangle - i\dot{a}(t) - ia(t) \sum_{l=1}^f 1 \cdot \langle \varphi_l(t) | \dot{\varphi}_l(t) \rangle \\ &= a(t)E(t) - i\dot{a}(t) - a(t) \sum_{l=1}^f g_l(t) \end{aligned}$$

donde se definió $E(t)$ la energía de la configuración (i.e. del producto de Hartree) propuesta y se hizo uso de la restricción (4.3) y la normalización de las SPF.

$$\implies \boxed{i\dot{a}(t) = a(t)E(t) - a(t) \sum_{l=1}^f g_l(t)} \quad (4.6)$$

- Para las variaciones $\delta\varphi_k$

$$\begin{aligned} 0 &= a(t) \sum_k \langle \Phi^{(k)} \delta\varphi_k | \hat{H} | \Phi \rangle - i\dot{a}(t) \sum_k \langle \Phi^{(k)} \delta\varphi_k | \Phi \rangle - ia(t) \sum_{k,l} \langle \Phi^{(k)} \delta\varphi_k | \Phi^{(l)} \dot{\varphi}_l \rangle \\ &= \sum_k \left[a(t) \langle \delta\varphi_k | \langle \Phi^{(k)} | \hat{H} | \Phi^{(k)} \rangle | \varphi_k \rangle - i\dot{a}(t) \langle \delta\varphi_k | \varphi_k \rangle - ia(t) \sum_l \langle \Phi^{(k)} \delta\varphi_k | \Phi^{(l)} \dot{\varphi}_l \rangle \right] \\ &= \sum_k \left[a(t) \langle \delta\varphi_k | \hat{\mathcal{H}}^k | \varphi_k \rangle - i\dot{a}(t) \langle \delta\varphi_k | \varphi_k \rangle - ia(t) \left(\langle \Phi^{(k)} | \Phi^{(k)} \rangle \langle \delta\varphi_k | \dot{\varphi}_k \rangle + \sum_{l \neq k} \langle \delta\varphi_k | \varphi_k \rangle, 1 \cdot \langle \varphi_l | \dot{\varphi}_l \rangle \right) \right] \\ &= \sum_k \langle \delta\varphi_k | \left[a(t) \hat{\mathcal{H}}^k | \varphi_k \rangle - a(t) \left(E - \sum_m g_m(t) \right) | \varphi_k \rangle - ia(t) \left(| \dot{\varphi}_k \rangle + | \varphi_k \rangle \sum_{l \neq k} (-i) g_l(t) \right) \right] \end{aligned}$$

donde se hizo uso de la (4.6). Nuevamente, como las variaciones son independientes, cada término de la sumatoria externa debe anularse, luego la ecuaciones de evolución para las SPF en TDH son:

$$\implies \boxed{i|\dot{\varphi}_k(t)\rangle = \left[\hat{\mathcal{H}}^k - E(t) + g_k(t) \right] |\varphi_k(t)\rangle \quad \forall k = 1, \dots, f} \quad (4.7)$$

Esta ecuación permite comprender el significado de las cantidades $\hat{\mathcal{H}}^k$, denominadas *campos medios*, que resumen las interacciones netas que los demás grados de libertad puedan ejercer con la k -ésima partícula.

4.2. Multiconfigurational Time-Dependent Hartree

Una de las principales limitaciones del método TDH surge por la naturaleza de construir la función de onda como un producto de SPF (1 sola configuración). Sin ir más lejos, si el hamiltoniano no es separable, esta aproximación introduce un error, el cual puede mantenerse relativamente pequeño si los términos de correlación involucrados son aproximadamente nulos en las regiones donde están localizadas las SPF, situación que generalmente no se da cuando se involucran estados del continuo electrónico.

Para dar solución a este problema surgen los métodos multi-configuracionales entre los cuales podemos encontrar el **Multi-configurational Time-dependent Hartree** que guarda muchas similitudes con el mencionado en Sec. 4.1 y que será empleado en este trabajo.

1. Ansatz MCTDH

Proponemos

$$\Psi(q_1, \dots, q_f, t) = \sum_{j_1}^{n_1} \cdots \sum_{j_f}^{n_f} \left[A_{j_1 \dots j_f}(t) \prod_{k=1}^f \varphi_{j_k}^{(k)}(q_k, t) \right] \quad (4.8)$$

cada tupla $(j_1 \dots j_f)$ se denomina una *configuración del sistema*. Resulta conveniente establecer las siguientes notaciones:

- Denotaremos cada configuración del sistema por un único índice $J = (j_1 \dots j_f)$
- $J^{(k)} = (j_1 \dots j_{k-1} j_{k+1} \dots j_f)$
- $J^{(k \rightarrow l_k)} = (j_1 \dots j_{k-1} l_k j_{k+1} \dots j_f)$

Con estas, podemos reescribir el ansatz (4.8) de forma más compacta

$$\begin{aligned} \Psi(t) &= \sum_J A_J(t) \Phi_J(t) \\ &= \sum_{j_k} \sum_{J^{(k)}} A_{J^{(k \rightarrow j_k)}}(t) \Phi_{J^{(k)}}(t) \varphi_{j_k}^{(k)}(t) \end{aligned} \quad (4.9)$$

$$= \sum_{j_k} \Psi_{j_k}^{(k)}(t) \varphi_{j_k}^{(k)}(t), \quad (4.10)$$

en donde hemos definido las cantidades $\Phi_J(t)$, $\Phi_{J^{(k)}}(t)$, $\Psi_{j_k}^{(k)}(t)$ que servirán para simplificar la notación.

Así como se vio en el método TDH, las SPF NO son únicas, por ende, es necesario imponer restricciones a las mismas para obtener ecuaciones de movimiento únicas. Las restricciones impuestas, en este caso se definen por

$$i \left\langle \varphi_{l_k}^{(k)}(t) \left| \dot{\varphi}_{j_k}^{(k)}(t) \right. \right\rangle = \left\langle \varphi_{l_k}^{(k)}(t) \left| \hat{g}^{(k)} \right| \varphi_{j_k}^{(k)}(t) \right\rangle \quad (4.11)$$

para todo $k = 1, \dots, f$ y $j_k, l_k = 1, \dots, n_k$. Los operadores $\hat{g}^{(k)}(t)$ son a priori arbitrarios. Si tomamos como SPF para cada DOF a un subconjunto de funciones ortonormales $\langle \varphi_{j_k}^{(k)} | \varphi_{l_k}^{(k)} \rangle = \delta_{j_k l_k}$:

$$\begin{aligned}
0 = \dot{S}_{j_k l_k} &= \langle \dot{\varphi}_{j_k}^{(k)} | \varphi_{l_k}^{(k)} \rangle + \langle \varphi_{j_k}^{(k)} | \dot{\varphi}_{l_k}^{(k)} \rangle \\
&= -i \left(- [\hat{g}^{(k)}]_{l_k j_k}^* + [\hat{g}^{(k)}]_{j_k l_k} \right) \\
&= -i \left(- [\hat{g}^{(k)\dagger}]_{j_k l_k} + [\hat{g}^{(k)}]_{j_k l_k} \right)
\end{aligned}$$

$\implies \hat{g}^{(k)}$ son operadores hermitianos

2. Ecuaciones de movimiento MCTDH

Nuevamente, derivamos las ecuaciones de movimiento a partir de (4.1), para ello notemos que

$$\begin{aligned}
\delta\Psi &= \delta \left[\sum_J A_J \Phi_J \right] \\
&= \sum_J \left[\delta A_J \Phi_J + A_J \sum_{k=1}^f \Phi_{J^{(k)}} \delta\varphi_{j_k}^{(k)} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_J A_J \Phi_J \right] \\
&= \sum_J \left[\dot{A}_J \Phi_J + A_J \sum_{k=1}^f \Phi_{J^{(k)}} \dot{\varphi}_{j_k}^{(k)} \right]
\end{aligned}$$

Ahora estamos en condiciones de plantear la ecuación variacional:

$$\begin{aligned}
0 &= \left\langle \delta\Psi \left| \hat{H} - i \frac{\partial}{\partial t} \right| \Psi \right\rangle \\
&= \left(\sum_L \left[\delta A_L^* \langle \Phi_L | + A_L^* \sum_{k=1}^f \langle \Phi_{L^{(k)}} \delta\varphi_{l_k}^{(k)} | \right] \right) \left(\sum_J \left[A_J \hat{H} | \Phi_J \rangle - i \dot{A}_J | \Phi_J \rangle - i A_J \sum_{\tilde{k}=1}^f | \Phi_{J^{(\tilde{k})}} \dot{\varphi}_{j_{\tilde{k}}}^{(\tilde{k})} \rangle \right] \right) \\
&= \sum_{L,J} \left[\delta A_L^* \left(A_J \langle \Phi_L | \hat{H} | \Phi_J \rangle - i \dot{A}_J \langle \Phi_L | \Phi_J \rangle - i A_J \sum_{\tilde{k}=1}^f \langle \Phi_L | \Phi_{J^{(\tilde{k})}} \dot{\varphi}_{j_{\tilde{k}}}^{(\tilde{k})} \rangle \right) \right] \\
&+ \sum_{L,J} \left[A_L^* A_J \sum_{k=1}^f \langle \Phi_{L^{(k)}} \delta\varphi_{l_k}^{(k)} | \hat{H} | \Phi_J \rangle - i A_L^* \dot{A}_J \sum_{k=1}^f \langle \Phi_{L^{(k)}} \delta\varphi_{l_k}^{(k)} | \Phi_J \rangle - \right. \\
&\quad \left. - i A_L^* A_J \sum_{k,\tilde{k}} \langle \Phi_{L^{(k)}} \delta\varphi_{l_k}^{(k)} | \Phi_{J^{(\tilde{k})}} \dot{\varphi}_{j_{\tilde{k}}}^{(\tilde{k})} \rangle \right]
\end{aligned}$$

Las variaciones δA_L^* y $\langle \delta\varphi_{l_k}^{(k)} | \forall k$ son arbitrarias e independientes, con lo cual, cada renglón de la ecuación anterior debe anularse por separado, así obtenemos:

- Para las variaciones de δA_L^*

$$0 = \sum_L \delta A_L^* \sum_J \left[A_J \langle \Phi_L | \hat{H} | \Phi_J \rangle - i \dot{A}_J \underbrace{\langle \Phi_L | \Phi_J \rangle}_{=\delta_{J,L}} - i A_J \sum_{\tilde{k}=1}^f \underbrace{\langle \Phi_L | \Phi_{J(\tilde{k})} \dot{\varphi}_{j_{\tilde{k}}}^{(\tilde{k})} \rangle}_{(\prod_{s \neq \tilde{k}} \delta_{j_s, l_s}) \langle \varphi_{l_{\tilde{k}}}^{(\tilde{k})} | \dot{\varphi}_{j_{\tilde{k}}}^{(\tilde{k})} \rangle} \right]$$

$$\stackrel{(4.11)}{=} \sum_L \delta A_L^* \left[-i \dot{A}_L + \sum_J A_J \langle \Phi_L | \hat{H} | \Phi_J \rangle - \sum_{\tilde{k}} \left(\sum_{j_{\tilde{k}}} A_{L \tilde{k} \rightarrow j_{\tilde{k}}} [\hat{g}^{(\tilde{k})}]_{l_{\tilde{k}} j_{\tilde{k}}} \right) \right]$$

Dado que las variaciones de los coeficientes δA_L^* son independientes entre sí, cada término dentro del corchete debe anularse individualmente, con lo cual obtenemos la primeras ecuaciones de movimiento del método

$$i \dot{A}_L(t) = \sum_J A_J \langle \Phi_L | \hat{H} | \Phi_J \rangle - \sum_{\tilde{k}} \left(\sum_{j_{\tilde{k}}} A_{L \tilde{k} \rightarrow j_{\tilde{k}}} [\hat{g}^{(\tilde{k})}]_{l_{\tilde{k}} j_{\tilde{k}}} \right) \quad \forall \text{ configuración } L \quad (4.12)$$

- Para las variaciones de $\delta \varphi_{l_k}^{(k)}$

$$0 = \sum_{L,J} \left[A_L^* A_J \sum_{k=1}^f \langle \Phi_{L^{(k)}} \delta \varphi_{l_k}^{(k)} | \hat{H} | \Phi_J \rangle - i A_L^* \dot{A}_J \sum_{k=1}^f \langle \Phi_{L^{(k)}} \delta \varphi_{l_k}^{(k)} | \Phi_J \rangle - \right.$$

$$\left. - i A_L^* A_J \sum_{k, \tilde{k}} \langle \Phi_{L^{(k)}} \delta \varphi_{l_k}^{(k)} | \Phi_{J(\tilde{k})} \dot{\varphi}_{j_{\tilde{k}}}^{(\tilde{k})} \rangle \right]$$

$$= \sum_k \sum_{L^{(k)}} \sum_{l_k} \sum_{J^{(k)}} \sum_{j_k} \left[A_L^* A_J \langle \delta \varphi_{l_k}^{(k)} | (\langle \Phi_{L^{(k)}} | \hat{H} | \Phi_{J^{(k)}} \rangle) | \varphi_{j_k}^{(k)} \rangle \right] -$$

$$- \sum_k \sum_J \sum_{L^{(k)}} \sum_{l_k} \left[i A_L^* \dot{A}_J \langle \Phi_{L^{(k)}} \delta \varphi_{l_k}^{(k)} | \Phi_J \rangle \right] +$$

$$+ \sum_{L,J} -i A_L^* A_J \sum_{k, \tilde{k}} \langle \Phi_{L^{(k)}} \delta \varphi_{l_k}^{(k)} | \Phi_{J(\tilde{k})} \dot{\varphi}_{j_{\tilde{k}}}^{(\tilde{k})} \rangle$$

$$\stackrel{(4.9)}{=} \sum_k \sum_{l_k} \langle \delta \varphi_{l_k}^{(k)} | \left[\sum_{j_k} (\langle \Psi_{l_k}^{(k)} | \hat{H} | \Psi_{j_k}^{(k)} \rangle) | \varphi_{j_k}^{(k)} \rangle \right] +$$

$$- \sum_k \sum_{l_k} \langle \delta \varphi_{l_k}^{(k)} | \left[\sum_J i \dot{A}_J \langle \Psi_{l_k}^{(k)} | \Phi_J \rangle \right] + \quad (4.13)$$

$$+ \sum_{L,J} \left[-i A_L^* A_J \sum_{k, \tilde{k}} \langle \Phi_{L^{(k)}} \delta \varphi_{l_k}^{(k)} | \Phi_{J(\tilde{k})} \dot{\varphi}_{j_{\tilde{k}}}^{(\tilde{k})} \rangle \right]$$

En analogía a lo encontrado en TDH, definimos los “campos medios”

$$\left[\hat{\mathcal{H}}^{(k)} \right]_{l_k, j_k} = \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \hat{H} \right| \Psi_{j_k}^{(k)} \right\rangle \quad (4.14)$$

Además, si utilizamos el resultado (4.12) puede reescribirse el segundo renglón de (4.13)

$$\begin{aligned} \sum_J \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Phi_J \right\rangle (i\dot{A}_J) &= \sum_J \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Phi_J \right\rangle \left(\left\langle \Phi_J \left| \hat{H} \right| \Psi \right\rangle - \sum_t \sum_{m_t} A_{Jt \rightarrow m_t} \left[\hat{g}^{(t)} \right]_{j_t m_t} \right) \\ &\stackrel{(4.9)}{=} \sum_J \sum_{S^{(k)}} A_{S^k \rightarrow l_k}^* \underbrace{\left\langle \Phi_{S^{(k)}} \left| \Phi_J \right\rangle}_{\left(\prod_{\nu \neq k} \delta_{s_\nu, j_\nu} \right) \left| \varphi_{j_k}^{(k)} \right\rangle} \left\langle \varphi_{j_k}^{(k)} \left| \Phi_{J^{(k)}} \left| \hat{H} \right| \Psi \right\rangle - \sum_J \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Phi_J \right\rangle \left(\sum_t \sum_{m_t} A_{Jt \rightarrow m_t} \left[\hat{g}^{(t)} \right]_{j_t m_t} \right) \\ &= \sum_{J^{(k)}} \left(\sum_{j_k} \left| \varphi_{j_k}^{(k)} \right\rangle \left\langle \varphi_{j_k}^{(k)} \right| \right) A_{J^k \rightarrow l_k}^* \left\langle \Phi_{J^{(k)}} \left| \hat{H} \right| \Psi \right\rangle - \sum_J \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Phi_J \right\rangle \left(\sum_t \sum_{m_t} A_{Jt \rightarrow m_t} \left[\hat{g}^{(t)} \right]_{j_t m_t} \right) \\ &= \hat{\mathcal{P}}^{(k)} \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \hat{H} \right| \Psi \right\rangle - \sum_J \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Phi_J \right\rangle \left(\sum_t \sum_{m_t} A_{Jt \rightarrow m_t} \left[\hat{g}^{(t)} \right]_{j_t m_t} \right) \\ &= \hat{\mathcal{P}}^{(k)} \sum_{j_k} \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \hat{H} \right| \Psi_{j_k}^{(k)} \right\rangle \left| \varphi_{j_k}^{(k)} \right\rangle - \sum_J \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Phi_J \right\rangle \left(\sum_t \sum_{m_t} A_{Jt \rightarrow m_t} \left[\hat{g}^{(t)} \right]_{j_t m_t} \right) \\ &\stackrel{(4.14)}{=} \hat{\mathcal{P}}^{(k)} \sum_{j_k} \left[\hat{\mathcal{H}}^{(k)} \right]_{l_k, j_k} \left| \varphi_{j_k}^{(k)} \right\rangle - \sum_{j_k} \sum_{J^{(k)}} \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Phi_J \right\rangle \left(\sum_t \sum_{m_t} A_{Jt \rightarrow m_t} \left[\hat{g}^{(t)} \right]_{j_t m_t} \right) \\ &= \hat{\mathcal{P}}^{(k)} \sum_{j_k} \left[\hat{\mathcal{H}}^{(k)} \right]_{l_k, j_k} \left| \varphi_{j_k}^{(k)} \right\rangle - \sum_{j_k} \sum_{m_k} \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Psi_{m_k}^{(k)} \right\rangle \left[\hat{g}^{(k)} \right]_{j_k m_k} \left| \varphi_{j_k}^{(k)} \right\rangle - \\ &\quad - \sum_{t \neq k} \sum_{m_t} \sum_{j_t} \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Psi_{m_t}^{(t)} \varphi_{j_t}^{(t)} \right\rangle \left[\hat{g}^{(t)} \right]_{j_t m_t} \\ &= \hat{\mathcal{P}}^{(k)} \sum_{j_k} \left[\hat{\mathcal{H}}^{(k)} \right]_{l_k, j_k} \left| \varphi_{j_k}^{(k)} \right\rangle - \sum_{j_k} \sum_{m_k} \left[\hat{\rho}^{(k)} \right]_{l_k, m_k} \left[\hat{g}^{(k)} \right]_{j_k m_k} \left| \varphi_{j_k}^{(k)} \right\rangle - \\ &\quad - \sum_{t \neq k} \sum_{m_t} \sum_{j_t} \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Psi_{m_t}^{(t)} \varphi_{j_t}^{(t)} \right\rangle \left[\hat{g}^{(t)} \right]_{j_t m_t} \end{aligned}$$

donde se ha definido el operador de densidad reducida cuyos elementos de matriz están dados por

$$\left[\hat{\rho}^{(k)} \right]_{l_k, m_k} = \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Psi_{m_k}^{(k)} \right\rangle \quad (4.15)$$

A su vez, el último término de (4.13) puede reescribirse a partir de (4.9)

$$\begin{aligned} \sum_{L, J} \left[-i A_L^* A_J \sum_{k, \bar{k}} \left\langle \Phi_{L^{(k)}} \delta \varphi_{l_k}^{(k)} \left| \Phi_{J^{(\bar{k})}} \dot{\varphi}_{j_{\bar{k}}}^{(\bar{k})} \right\rangle \right] &= \\ &\stackrel{(4.9)}{=} \sum_k \sum_{l_k} \left\langle \delta \varphi_{l_k}^{(k)} \left| \left[(-i) \sum_{j_k} \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Psi_{j_k}^{(k)} \right\rangle \left| \dot{\varphi}_{j_k}^{(k)} \right\rangle + (-i) \sum_{\bar{k} \neq k} \sum_{j_{\bar{k}}} \left\langle \Psi_{l_k}^{(k)} \left| \Psi_{j_{\bar{k}}}^{(\bar{k})} \right\rangle \dot{\varphi}_{j_{\bar{k}}}^{(\bar{k})} \right] \right. \right. \\ &= \sum_k \sum_{l_k} \left\langle \delta \varphi_{l_k}^{(k)} \left| \left[(-i) \sum_{j_k} \left[\hat{\rho}^{(k)} \right]_{l_k, j_k} \left| \dot{\varphi}_{j_k}^{(k)} \right\rangle + (-i) \sum_{\bar{k} \neq k} \sum_{j_{\bar{k}}} \sum_{T^{(k)}, S^{(\bar{k})}} A_{T^k \rightarrow l_k}^* A_{S^{\bar{k}} \rightarrow j_{\bar{k}}} \underbrace{\left\langle \Phi_{T^{(k)}} \left| \Phi_{S^{(\bar{k})}} \right\rangle \dot{\varphi}_{j_{\bar{k}}}^{(\bar{k})} \right\rangle}_{\left[\hat{g}^{(\bar{k})} \right]_{j_{\bar{k}} j_{\bar{k}}} \left| \varphi_{j_{\bar{k}}}^{(\bar{k})} \right\rangle \prod_{(\nu \neq k, \bar{k})} \delta_{s_\nu t_\nu} \right] \right. \end{aligned}$$

Volviendo a la ecuación variacional para las funciones de onda (4.13), tenemos que

$$\begin{aligned}
0 = & \sum_k \sum_{l_k} \langle \delta\varphi_{l_k}^{(k)} | \left[\sum_{j_k} [\hat{\mathcal{H}}^{(k)}]_{l_k, j_k} |\varphi_{j_k}^{(k)}\rangle - \hat{\mathcal{P}}^{(k)} [\hat{\mathcal{H}}^{(k)}]_{l_k, j_k} |\varphi_{j_k}^{(k)}\rangle - i [\hat{\rho}^{(k)}]_{l_k, j_k} |\dot{\varphi}_{j_k}^{(k)}\rangle + \right. \\
& - \sum_{j_k} \sum_{m_k} [\hat{\rho}^{(k)}]_{l_k, j_k} [\hat{g}^{(k)}]_{j_k, m_k} |\varphi_{j_k}^{(k)}\rangle + \\
& - \sum_{t \neq k} \sum_{m_t} \sum_{j_t} \langle \Psi_{l_k}^{(k)} | \Psi_{m_t}^{(t)} \varphi_{j_t}^{(t)} \rangle [\hat{g}^{(t)}]_{j_t, m_t} + \\
& \left. (-i) \sum_{\tilde{k} \neq k} \sum_{j_{\tilde{k}}} \sum_{T^{(k)}, S^{(\tilde{k})}} A_{T^{(k)} \rightarrow l_k}^* A_{S^{(\tilde{k})} \rightarrow j_{\tilde{k}}} \left([\hat{g}^{(\tilde{k})}]_{t_{\tilde{k}}, j_{\tilde{k}}} |\varphi_{j_{\tilde{k}}}^{(\tilde{k})}\rangle \prod_{(\nu \neq k, \tilde{k})} \delta_{s_\nu, t_\nu} \right) \right]
\end{aligned} \tag{4.16}$$

Por la independencia de las variaciones $\delta\varphi_{l_k}^{(k)}$, cada término en los corchetes de (4.16) debe anularse individualmente, resultando así, junto con (4.12) las ecuaciones de movimiento del método MCTDH.

Para trabajar, deben elegirse las restricciones (4.11). Las opciones más utilizadas son

- $\hat{g}^{(k)} \equiv 0$
- En caso de que el hamiltoniano pueda escribirse como $\hat{H}(q_1, \dots, q_f) = \sum_k \hat{h}^{(k)}(q_k) + H_R$:
 $\hat{g}^{(k)} \equiv h^{(k)}$

La elección de una u otra restricción depende del tipo del problema en estudio y de los métodos de resolución elegidos. En el presente trabajo, por simplicidad se elige un esquema de integración de campo medio constante (constant mean-field) (CMF), en este esquema, la elección $\hat{g}^{(k)} \equiv 0$ es la más conveniente [Han11]. Con lo cual las ecuaciones de movimiento del método MCTDH empleadas resultan:

$$\boxed{i\dot{A}_L(t) = \sum_J A_J \langle \Phi_L | \hat{H} | \Phi_J \rangle \quad \forall \text{ configuración } L} \tag{4.17}$$

$$\boxed{i\dot{\varphi}_{l_k}^{(k)} = (1 - \hat{\mathcal{P}}^{(k)}) \sum_{j_k} \sum_{m_k} [\hat{\rho}^{(k)-1}]_{l_k, j_k} [\hat{\mathcal{H}}^{(k)}]_{j_k, m_k} \varphi_{m_k}^{(k)} \quad \forall l_k \quad \forall k = 1, \dots, f} \tag{4.18}$$

3. Cálculo de Observables de interés

Este trabajo está centrado en la estimación del tiempo de decaimiento de la resonancias de los sistemas con lo cual recurriremos al cálculo de la **función de autocorrelación** [Nau90] del estado cuántico.

La función de autocorrelación se define como

$$a(t) = \langle \Psi(x, 0) | \Psi(x, t) \rangle \tag{4.19}$$

es así que el módulo cuadrado de la autocorrelación $|a(t)|^2$ mide el grado de solapamiento entre un estado a tiempo t respecto a su configuración a tiempo inicial $t = 0$. Por ende, permite exhibir de manera conveniente el decaimiento de un estado inicial a algún otro estado del sistema.

Para estados resonantes, es sencillo determinar una expresión analítica exacta para la autocorrelación. Como se mencionó en el capítulo 1 las resonancias pueden estudiarse como autoestados correspondientes al espectro no hermitiano del hamiltoniano, asociados a una autoenergía compleja¹:

¹Recordar, que trabajamos con magnitudes adimensionales

$$\varepsilon_{res} = \varepsilon_r - i\frac{\Gamma}{2}$$

por ende,

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-i\varepsilon_{res}t}|\Psi(0)\rangle \\ \implies a(t) &= \langle\Psi(x,0)|\Psi(x,t)\rangle = e^{-i\varepsilon_{res}t} \\ \implies |a(t)|^2 &= e^{-\Gamma t} \end{aligned} \tag{4.20}$$

es decir, para las resonancias del sistema, la autocorrelación presenta un decaimiento exponencial con tiempo característico

$$\tau = \frac{1}{\Gamma}$$

Así, para el sistema tratado, este comportamiento es el que se espera obtener, excepto para tiempos muy cortos en los cuales el decaimiento es cuadrático [Per80].

Nota: La implementación de este método de evolución temporal en este trabajo será realizada con el paquete de software “*The Heidelberg MCTDH Package*” desarrollado por el *Instituto de Física Química de Universidad de Heidelberg* [HV22].

4.3. Potenciales de Absorción Complejos

Al emplear una representación DVR para tratar problemas de disociación o scattering, se introduce una pared infinita de potencial en los extremos de la grilla (c.f. (3.13)). Como consecuencia de esto, un paquete de ondas con condición de contorno saliente es artificialmente reflejado, interfiriendo con la evolución del sistema y afectando el análisis de observables. Una solución a este problema sería involucrar grillas de mayor tamaño, lo cual implicaría un tiempo de cálculo mucho mayor.

En este trabajo se adoptó como solución la implementación de potenciales de absorción complejos (complex absorbing potentials) (CAP) en los puntos más cercanos a los bordes de la grilla; éstos consisten en agregar al hamiltoniano del sistema términos de la forma:

$$-i\eta w(y)$$

siendo $w(y)$ una función real **no negativa**. Estos potenciales actúan como una condición de contorno absorbente, como se verá a continuación. Los CAPs más utilizados son los potenciales monomiales

$$-i\eta w(y) = -i\eta |y - y_c|^n \Theta(y - y_c) \tag{4.21}$$

en donde el parámetro y_c indica la zona de activación (y la longitud L) del CAP, y los parámetros η y n representan la intensidad y orden del potencial, respectivamente.

El funcionamiento de los CAPs se basa en el siguiente concepto: al agregar los términos de (4.21) en el hamiltoniano del sistema, el mismo pierde su hermiticidad; analizaremos cómo se ve afectada la norma de la función de onda por este cambio, supongamos que el hamiltoniano del sistema puede escribirse como

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - i\eta\hat{W}$$

con \hat{H}_0 hermitiano, entonces

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \|\Psi\|^2 &= \langle \dot{\Psi} | \Psi \rangle + \langle \Psi | \dot{\Psi} \rangle \\
 &= \langle -i\hat{H}\Psi | \Psi \rangle + \langle \Psi | -i\hat{H}\Psi \rangle \\
 &= i \langle \Psi | \hat{H}^\dagger - \hat{H} | \Psi \rangle \\
 &= -2\eta \langle \Psi | \hat{W} | \Psi \rangle < 0
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

Así, demostramos que la función de onda decrece su norma siendo absorbida por el CAP (de allí su nombre).

Es importante notar que, a pesar de la pérdida de hermiticidad, la inclusión de CAPs en los extremos de las grillas DVR **NO** afecta el cálculo de observables como la autocorrelación (4.19) dado que no se produce un overlap de la región de CAPs con los estados iniciales localizados $\Psi(0)$ usados en este trabajo.

En contraparte, la absorción del paquete de ondas por el CAP no es perfecta, parte del mismo es reflejada y transmitida [RM96]; por ello, dado un rango de energías de interés, los parámetros (η y L) de los CAPs son elegidos buscando maximizar la absorción del mismo, o equivalentemente, buscamos

$$|R|^2 + |T|^2 \ll 1$$

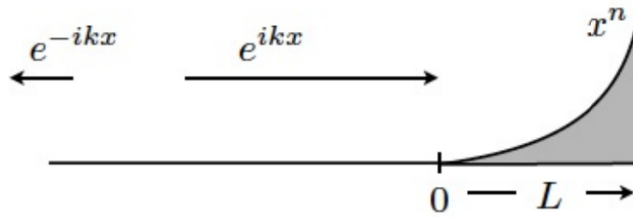


Figura 4.1: Representación esquemática del comportamiento no ideal de un CAP de largo L sobre el cual incide una onda plana con vector de onda k . Imagen tomada de [Han11].

Apelando a argumentos semiclásicos y la teoría de scattering, es posible derivar fórmulas aproximadas para los coeficientes de reflexión y transmisión [Han11]

$$R^2 = \left(\frac{n!}{2^{n+2}} \right)^2 \frac{\eta^2}{E^2 k^2} \tag{4.23}$$

$$T^2 = \exp \left(-\frac{\eta W(L)}{E} \frac{kL}{n+1} \right) \tag{4.24}$$

donde el vector de onda k se define según $E = k^2/2m^*$. Las expresiones anteriores muestran que en general conviene utilizar potenciales “débiles” pero de “gran longitud”. El paquete de software de MCTDH permite evaluar las ecuaciones anteriores, dado un orden de CAP y un rango energético de interés a absorber, para encontrar el parámetro η_{optimo} . En este trabajo se empleó un CAP de orden $n = 2$ y longitud $L = 10 ad.u.$ La Fig. 4.2 muestra las curvas de los coeficientes de R^2 , T^2 y $R^2 + T^2$ para el rango de energías de las resonancias bajo estudio para la intensidad de CAP óptima:

$$\eta_{opt} = 0,01289 ad.u. \tag{4.25}$$

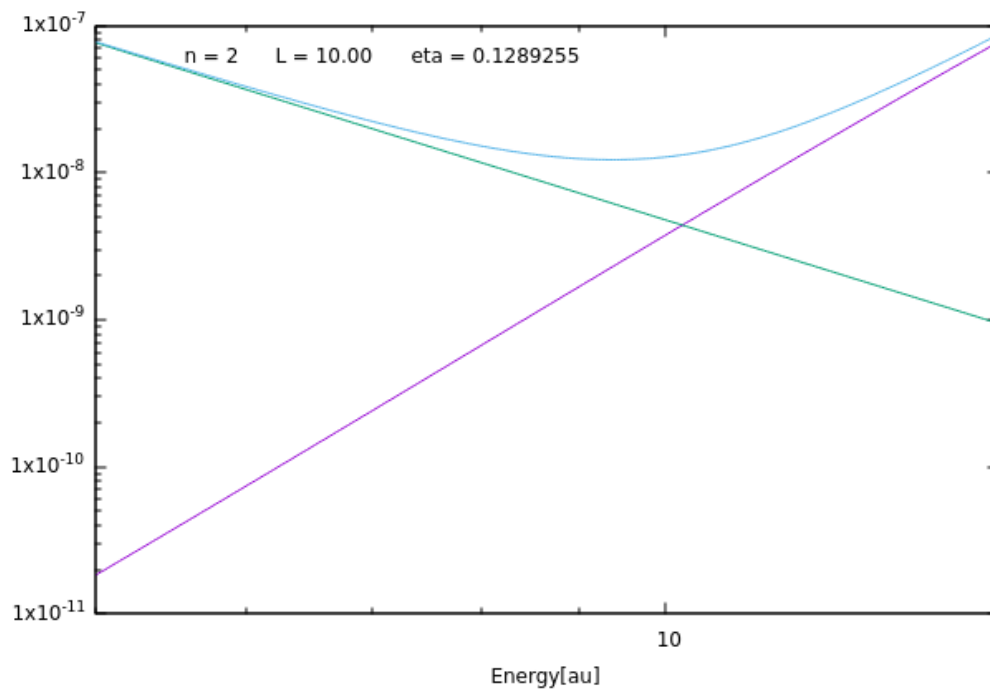


Figura 4.2: Curvas del coeficiente de reflexión (curva verde), transmisión (curva morada) y $R^2 + T^2$ (curva celeste) para un el CAP de orden $n = 2$ y longitud $L = 10$ ad.u., optimizado en el rango energético 5 – 10 ad.u.

Capítulo 5

Estudio de Resonancias de Forma - Hamiltoniano de una Partícula

Si bien objetivo principal de este trabajo es el estudio del fenómeno de ICD, tratado como una resonancia de Feshbach del sistema de 2 electrones, el entendimiento de las resonancias del sistema de 1 electrón juega un papel clave en la explicación de resultados asociados a este fenómeno obtenidos en el siguiente capítulo y reportados en [Gol+15].

Como se mencionó en la introducción los estados resonantes no son un fenómeno exclusivo de sistemas de varios grados de libertad, en este capítulo se exploran las resonancias de forma en un sistema de una partícula en un doble pozo de potencial proponiendo una herramienta útil para el estudio de las mismas: la Densidad de Estados Local, LDOS por sus siglas en inglés.

5.1. Densidad de Estados Local del Sistema

La densidad de estados local (local density of states) (**LDOS**) es una herramienta clave para la descripción teórica de muchas propiedades electrónicas en sistemas nanoscópicos y mesoscópicos. Fue introducida en los años 50 por pioneros de la física de estado sólido. Denotada como $D(\vec{r}, E)$, se obtiene agregando un peso a la contribución de cada estado a la densidad de estados (density of states) (**DOS**) del sistema, siendo este peso la densidad de probabilidad asociada a dicho estado [Bah+88]

$$D(\vec{r}, E) = \sum_k |\phi_k(\vec{r})|^2 \delta(E - E_k)$$

Así, la LDOS representa la densidad de estados cuánticos disponibles para que un electrón los ocupe en una región espacial localizada en un entorno $d\vec{r}$ de \vec{r} y a una energía E determinadas. Su dependencia funcional tanto de las variables espaciales como de la energía la vuelven idónea para identificar estados resonantes, simetrías y sus correspondientes energías.

A partir del operador de Green, la LDOS puede ser calculada mediante la ecuación [Bah+88]:

$$D(\vec{r}, E) = \frac{2}{\pi} \text{Im} (G(\vec{r}, \vec{r}, E)) \quad (5.1)$$

donde \vec{r} son todas las variables espaciales que describen el problema a tratar, en el caso actual 1D, la denotaremos “x”, y el prefactor 2 se debe a la degeneración por spin del sistema.

Dado que las autoenergías y autoestados del sistema son obtenidos por la diagonalización del hamiltoniano, se empleó la representación espectral del operador de Green ¹:

$$G(\vec{r}, \vec{r}', E) = \lim_{\alpha \rightarrow 0^+} \sum_k \frac{\psi_k(\vec{r}) \psi_k^*(\vec{r}')}{E - E_k - i\alpha} \quad (5.2)$$

¹El estudio general de la función de Green en la expresión aquí presentada se conoce como Teoría de Fredholm [EE18] su discusión escapa de los fines del presente trabajo.

En la práctica se utiliza un parámetro α pequeño pero finito, el cual debió ajustarse en cada caso en particular según la densidad de estados que se obtiene de la discretización del continuo (cf. Sec. 3.4.1). Con esta expansión podemos aprovechar la simplicidad que ofrece el método DVR para representar las funciones de onda (cf. (3.12)).

La DOS del sistema puede ser recuperada mediante integración sobre las variables espaciales

$$\rho(E) = \int_{-\infty}^{\infty} D(x, E) dx \quad (5.3)$$

En la Fig. 5.1 presentamos la LDOS para el sistema objeto de estudio de este trabajo, para una separación entre los pozos de $d = 136,8 \text{ \AA}$. Se observan claramente concentraciones altas de densidad de probabilidad confinadas en la región que comprende los pozos, éstas corresponden a:

- Los tres estados ligados del sistema para energías por debajo del umbral $E = 0$.
- Y también para $E = 29,9 \text{ meV}$ y $E = 111,3 \text{ meV}$ correspondientes a las resonancias de forma del sistema.

La densidad local de estados muestra un aumento en regiones cercanas a las energías correspondientes a las resonancias. Este aumento en la densidad puede deberse a contribuciones de varios estados de los obtenidos en la representación DVR. De allí la importancia de la representación de la LDOS, ya que observando todos los estados discretos obtenidos por DVR por separado, no se evidencia la presencia de la resonancia tan fácilmente. Aún así, en algunos casos se puede identificar algún estado discreto de DVR con la resonancia. Nótese, por ejemplo, la concordancia con las amplitudes de probabilidad de dichos estados mostrados en Fig. 5.2 y la LDOS de la Fig. 5.1.

Por su parte, en la región exterior a los pozos de la Fig. 5.1 encontramos las densidades de probabilidad correspondientes a las condiciones de contorno oscilatorias de dichos estados.

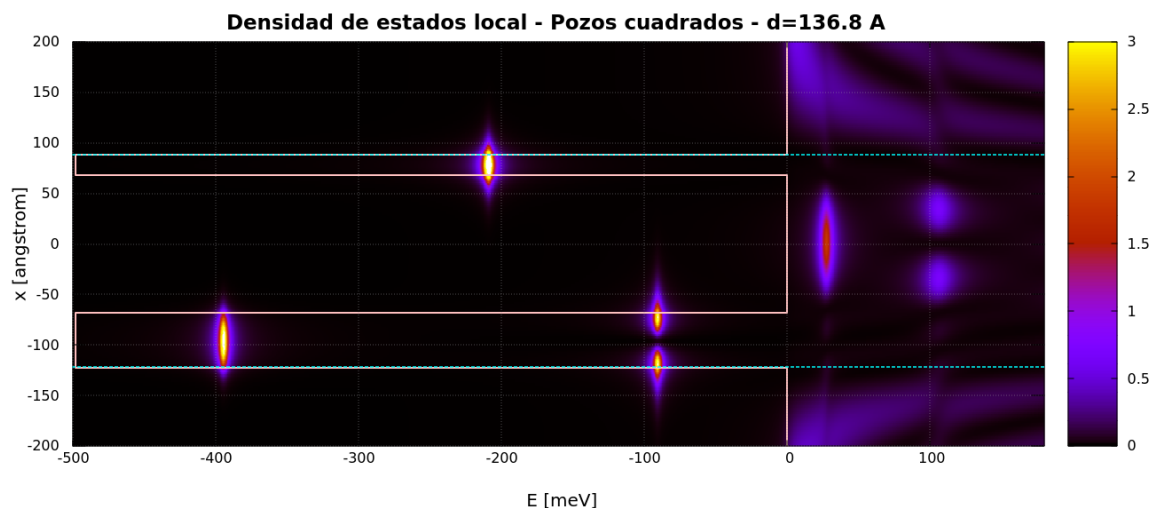


Figura 5.1: LDOS para el hamiltoniano de una sola partícula con separación inter-pozo $d = 136,8 \text{ \AA}$. Superpuesto se encuentra el potencial de pozos cuadrados. Además de los estados ligados, se observan claramente los estados resonantes altamente localizados en la región inter-pozo a energías $E = 29,9 \text{ meV}$ y $E = 111,3 \text{ meV}$. Las líneas de puntos celestes delimitan la región de integración espacial acotada mencionada en Sec. 5.2.

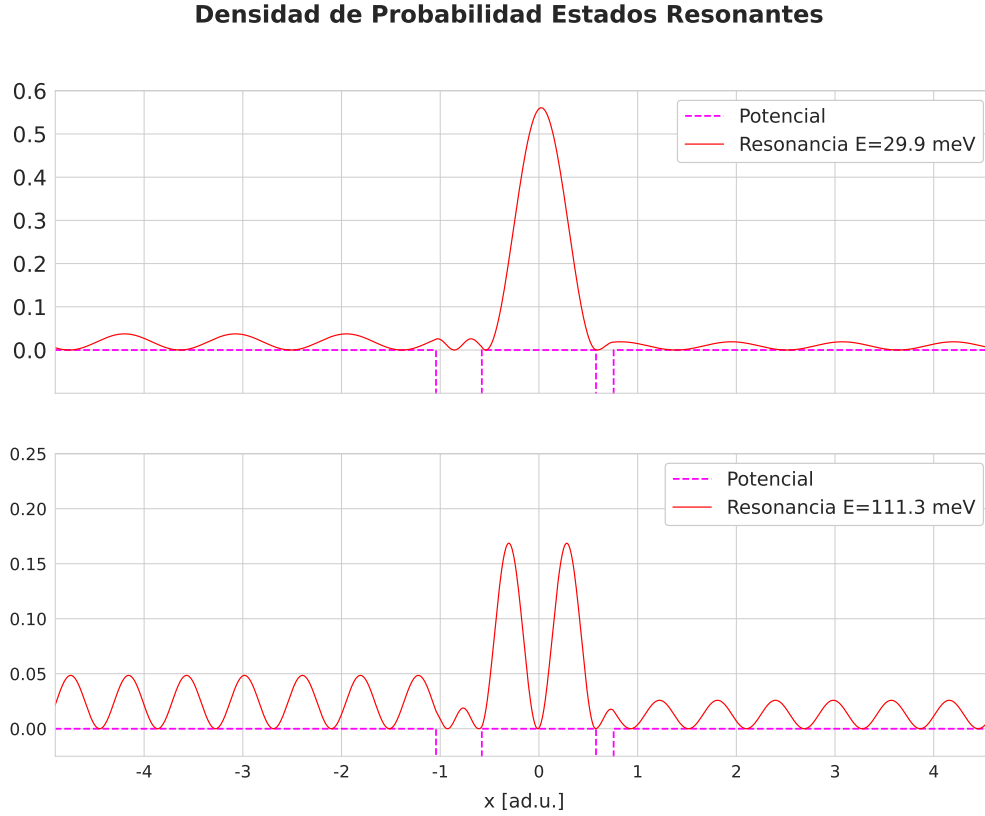


Figura 5.2: Densidades de probabilidad $|\psi(x)|^2$ de los estados resonantes visualizados en Fig. 5.1.

5.2. Densidad de Estados y Resonancias de Forma

La presencia de estados resonantes del sistema trae consigo modificaciones sobre las densidades de estado del espectro continuo del mismo: se produce una concentración de estados en las energías de resonancia, ésto es traducido en una desviación del comportamiento usualmente obtenido para sistemas unidimensionales:

$$\rho_c(E) \propto \frac{1}{\sqrt{E}} \quad (5.4)$$

Siguiendo la terminología usada en el estudio de resonancias, podemos distinguir dos contribuciones a la DOS [KH04]:

$$\rho(E) = \rho^Q(E) + \rho^P(E) \quad (5.5)$$

donde se identifica a $\rho^Q(E)$ como la densidad de estados resultante por la presencia de una resonancia aislada del sistema a energía E . El mapeo de la DOS sobre las coordenadas espaciales que conseguimos con la LDOS permite discriminar dicha contribución integrando sobre una región acotada del espacio, llámese Q , como la indicada en la Fig. 5.1, extendiendo dicha región de integración a todo el espacio se recupera $\rho(E)$ como se muestra en la Fig 5.3.

Además, con este procedimiento es posible calcular los tiempos de vida de las resonancias, veamos ésto para el caso en que el sistema posee resonancias aisladas: sean k_r los números cuánticos que identifican a los estados resonantes, si separamos la contribución de dichos estados en la sumatoria de (5.2) y reemplazamos en (5.3) ².

²Recordar: Como se mencionó en (1.7) los estados resonantes poseen energías complejas.

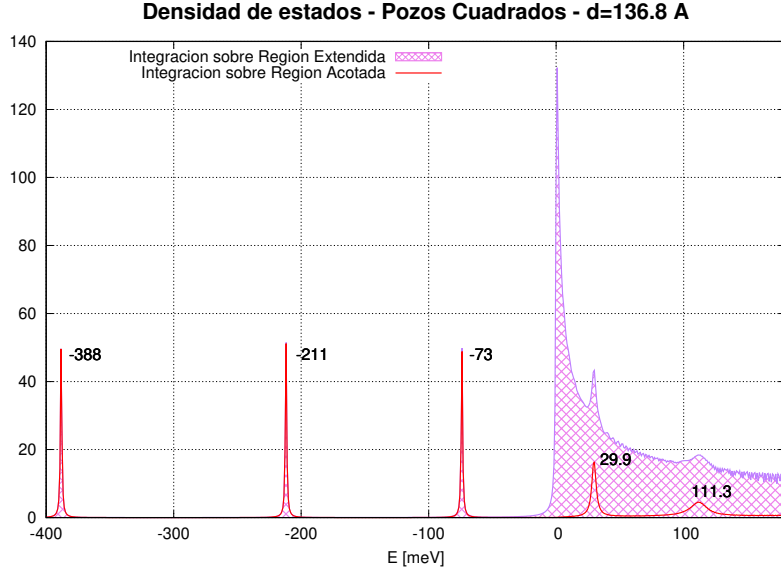


Figura 5.3: Contribuciones a la densidad de estados del sistema de una partícula: $\rho^Q(x)$ en rojo, obtenida de integración en la región delimitada en Fig. 5.1 y $\rho(x)$ en violeta obtenida de integración en una región espacial más extendida. En realidad, la $\rho^Q(x)$ incluye, además de las contribuciones de las resonancias, las de los estados ligados por debajo del umbral que aparecen con un ancho ficticio debido al tratamiento numérico de la representación (5.2).

$$\rho^Q(E) = \frac{2}{\pi} \int_Q \text{Im} \left[\sum_{\tilde{k}} \frac{|\psi_{\tilde{k}}(x)|^2}{E - E_{\tilde{k}} - i\alpha^+} + \sum_{k_r} \frac{|\psi_{k_r}(x)|^2}{E - (E_{k_r} - i\Gamma_{k_r}/2) - i\alpha^+} \right] dx \quad (5.6)$$

$$= \frac{2}{\pi} \sum_{\tilde{k}} \frac{\alpha^+ \int_Q |\psi_{\tilde{k}}(x)|^2 dx}{(E - E_{\tilde{k}})^2 + (\alpha^+)^2} + \frac{2}{\pi} \sum_{k_r} \left(\int_Q |\psi_{k_r}(x)|^2 dx \right) \frac{\Gamma/2}{(E - E_{k_r}^{\text{real}})^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (5.7)$$

La expresión obtenida está en concordancia con los reportes en la literatura sobre la forma funcional de $\rho^Q(E)$ en un entorno de las energías de resonancias [POS10]:

$$\rho^Q(E) = \rho_0 + \frac{A}{\pi} \frac{\Gamma/2}{(E - E_r)^2 + (\Gamma/2)^2} \quad (5.8)$$

A partir de un ajuste con una función lorentziana $\mathcal{L}(E; E_r, \Gamma)$ obtenemos las posiciones y los anchos de resonancias como se muestran en Fig. 5.4 y Tabla 5.1.

Para finalizar esta sección, podemos destacar la esperable fuerte dependencia de las resonancias de forma con la configuración espacial del sistema, como se evidencia en la Fig. 5.5 donde cada curva representa la DOS para diferentes separaciones d entre los pozos, manteniendo los anchos y profundidad de los mismos inalterados (c.f. Fig. 2.2).

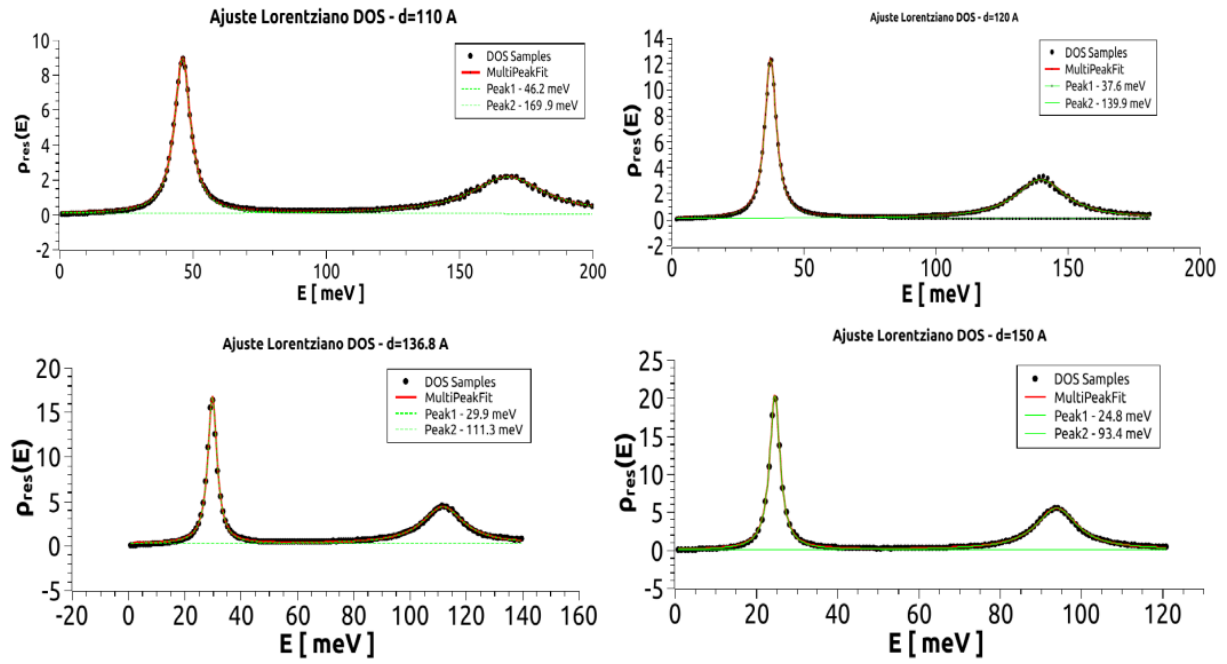


Figura 5.4: Ajustes lorentzianos a las densidades de estados $\rho_{res}(E)$ para diferentes distancias inter-pozo

Distancia inter-pozo [\AA]	Γ [meV]	τ [s]
$d = 110$	14,54	$0,453 \times 10^{-13}$
	66,52	$0,098 \times 10^{-13}$
$d = 120$	10,44	$0,630 \times 10^{-13}$
	46,68	$0,141 \times 10^{-13}$
$d = 136,80$	7,82	$0,842 \times 10^{-13}$
	35,1	$0,188 \times 10^{-13}$
$d = 150$	6,312	$1,043 \times 10^{-13}$
	624,74	$0,266 \times 10^{-13}$

Tabla 5.1: Anchos característicos y tiempos de vida medios para las resonancias de forma del hamiltoniano de una partícula para diferentes distancias inter-pozo

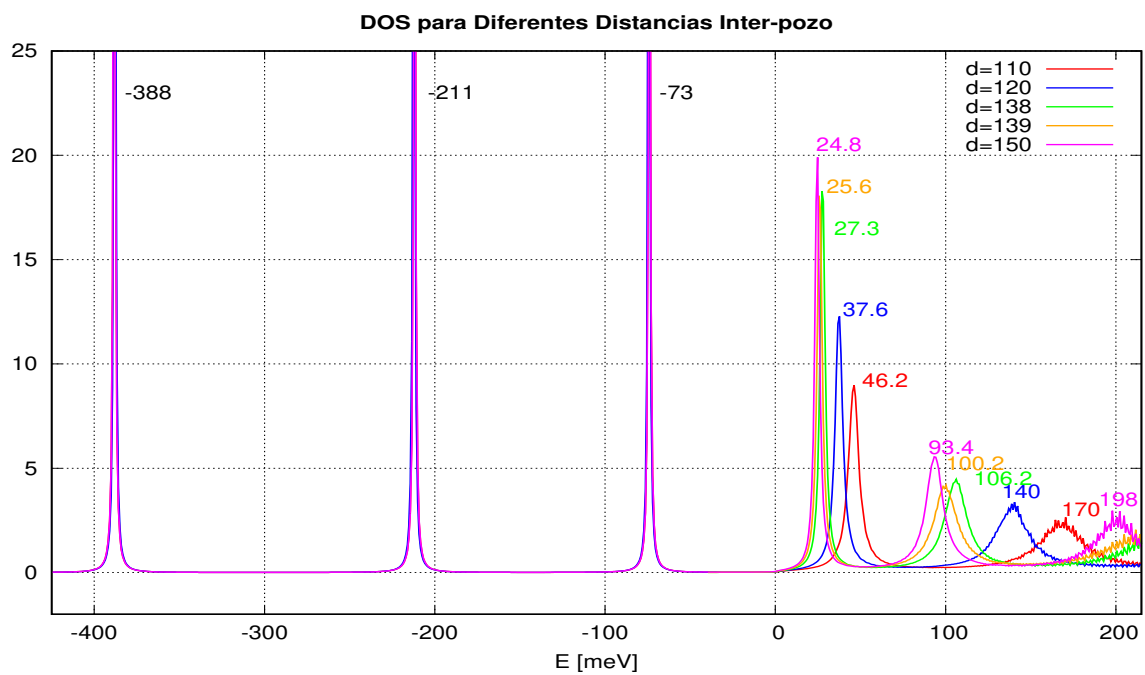


Figura 5.5: Dependencia de las resonancias de forma con la configuración del sistema tratado, se observa una fuerte influencia en las posiciones de los picos en $\rho^Q(E)$ con la distancia inter-pozo d .

Capítulo 6

Dinámica del Proceso ICD

En este capítulo, el fenómeno ICD es abordado utilizando métodos dependientes e independientes del tiempo. Desde la perspectiva dinámica, se utilizó el método MCTDH desarrollado en el Capítulo 4 para simular la dinámica electrónica. Por otro lado, en lo concerniente a los métodos independientes del tiempo el estudio está basado en la regla de oro de Fermi presentada en la Introducción (1.6).

Con ambos métodos se estiman los tiempos de vida medios de las resonancias Feshbach del proceso ICD en el sistema de dos electrones interactuantes en la nanoestructura de doble pozo de potencial.

6.1. Método Dependiente del Tiempo: MCTDH

6.1.1. Definición del Estado Inicial y Evolución Temporal

Como se mencionó en el Capítulo 4, cuando se utilizan métodos dependientes del tiempo, es necesario definir una condición o estado inicial. Se ha estudiado un proceso ICD basado en la correlación de electrones ubicados uno en cada QW como se observa en el panel (a) de la Fig. 6.1. El electrón ubicado en el pozo izquierdo se encuentra en un estado excitado del pozo, mientras que el de la derecha está en el estado fundamental de su correspondiente pozo (los estados ligados de los pozos son los autoestados del hamiltoniano de una partícula (2.5)). Para crear una condición inicial como ésta una opción es utilizar láseres para excitar electrones de valencia a los estados de los pozos creados en la de conducción. Como resultado de la interacción repulsiva entre ambos, el electrón en el pozo izquierdo decae al estado fundamental de dicho pozo, transfiriendo el exceso de energía al electrón del pozo derecho, ionizándose este último como se muestra en el panel (b).

Existen algunos requisitos para que el proceso ICD se realice en la evolución dinámica de este sistema:

- Primero, los estados ligados de ambos pozos deben tener una superposición pequeña. Ésto es así pues si existiese un solapamiento significativo de las funciones de onda, un electrón podría tunear al otro pozo, siendo este el proceso más efectivo que ICD.
- La correlación (repulsión coulombiana) debe ser lo suficientemente fuerte como para hacer el ICD efectivo ante otros procesos de decaimiento mencionados en Capítulo 1, con lo cual los pozos no pueden alejarse indefinidamente.
- El último y más interesante, es la conservación de la energía durante el proceso. La pérdida de energía en el decaimiento del electrón excitado debe compensarse con una ganancia energética del electrón ionizado. Si E_1, E_2, E_3 son las energías de los estados ligados involucrados, como se muestra en Fig. 6.1, y denotamos $E_c > 0$ la energía del electrón eyectado

entonces

$$|\Delta E_L| = E_3 - E_1 = |E_c - E_2| = |\Delta E_R| \implies E_c = -E_1 + E_2 + E_3. \quad (6.1)$$

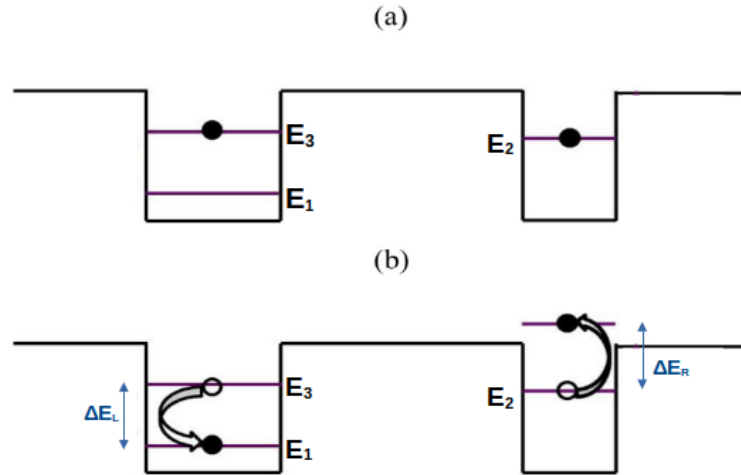


Figura 6.1: **Panel superior:** estado inicial del proceso ICD. El electrón del pozo izquierdo está en un estado excitado de dicho pozo mientras que el otro está en el estado ligado. **Panel inferior:** dinámica del proceso ICD, el electrón del estado excitado decae al estado fundamental de su pozo produciendo la ionización del otro electrón.

Teniendo en cuenta la **indistinguibilidad** de las partículas, la configuración inicial es construida a partir de una *combinación lineal simétrica (singlete) o antisimétrica (triplete)* de autoestados del hamiltoniano de una partícula:

$$\Psi(x_1, x_2, t = 0) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{E_3}(x_1)\phi_{E_2}(x_2) \pm \phi_{E_2}(x_1)\phi_{E_3}(x_2)] \quad (6.2)$$

siendo ϕ_{E_i} los estados ligados de (2.5).

6.1.2. Autocorrelación y Tiempos de Decaimientos - MCTDH

La evolución temporal $\Psi(x_1, x_2, t)$ del estado inicial del sistema (6.2) fue realizada con las ecuaciones de movimiento del método MCTDH deducidas anteriormente (cf. (4.17) y (4.18)) y el observable de interés, la autocorrelación, es calculado a partir de (4.19).

En la Fig. 6.2 se presenta la función de autocorrelación $a(t)$ (en escala semilogarítmica) en el caso particular del estado triplete para distintas separaciones “d” entre los pozos de potencial.

Nótese que la evolución temporal de este sistema es lenta en escalas temporales empleadas.

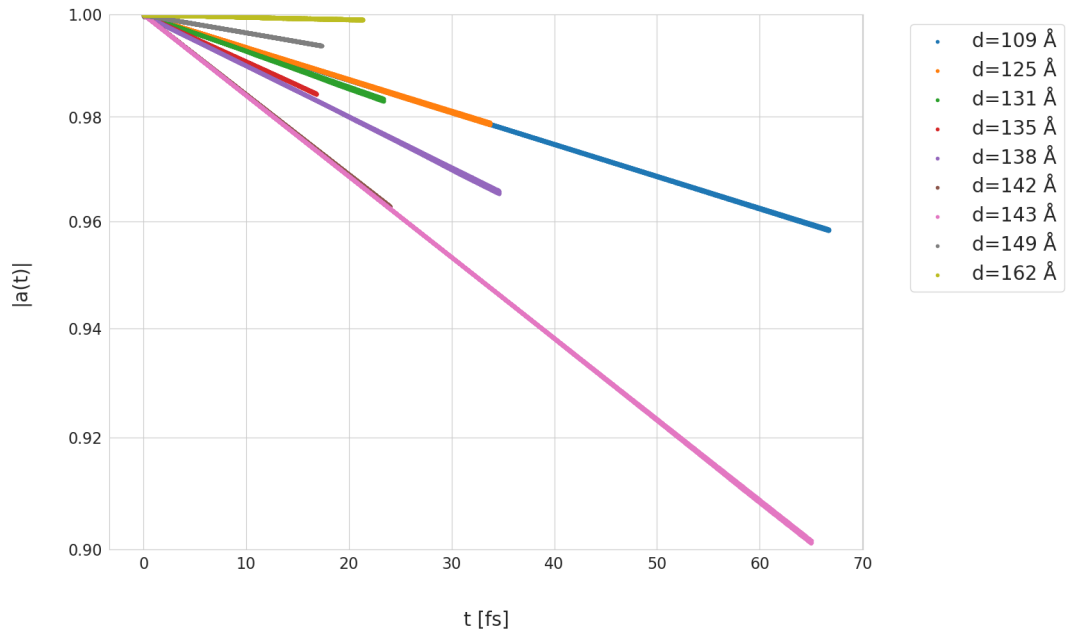
Autocorrelación $a(t)$ del Sistema de Pozos Cuadrados a diferentes distancias interpuzos

Figura 6.2: Funciones de autocorrelación $a(t)$ para el estado triplete calculadas a partir de evoluciones temporales del sistema para varias distancias inter-pozo en escala semilogarítmica, se observa el comportamiento exponencial de la autocorrelación mencionado en (4.20).

Hemos dicho que, cuando el estado del sistema se corresponde con una resonancia ($\varepsilon_{res} = \varepsilon_r - i\Gamma/2$) la forma funcional de la autocorrelación es una exponencial con tiempo de decaimiento $\tau = 1/\Gamma$ (el cual llamamos tiempo de decaimiento del estado de resonancia) (cf. (4.20)). De esta forma el tiempo de vida de las resonancias puede calcularse mediante un ajuste lineal de

$$y = \ln(|a(t)|^2) = -\frac{1}{\tau}t + c$$

En la sección siguiente se reportan los tiempos de decaimiento calculados, expresados en segundos, con este y otros métodos.

6.2. Método Independiente del Tiempo: Regla de Oro de Fermi

Como se ha mencionado anteriormente, la Regla de Oro de Fermi es un resultado derivado de la teoría de perturbaciones para calcular la tasa de transición, es decir, la probabilidad de que se produzca una transición dada por unidad de tiempo, en este caso de un estado localizado del sistema (estado inicial) (6.2):

$$\Psi_{inic}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{E_3}(x_1)\phi_{E_2}(x_2) \pm \phi_{E_2}(x_1)\phi_{E_3}(x_2)] \quad (6.3)$$

a un estado final donde uno de los electrones no está confinado:

$$\Psi_{fin}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\phi_{E_1}(x_1)\phi_{E_c}(x_2) \pm \phi_{E_c}(x_1)\phi_{E_2}(x_2)] \quad (6.4)$$

siendo ϕ_{E_i} autoestados del hamiltoniano (no perturbado) $\hat{H}_0(x_1, x_2) = \hat{h}(x_1) + \hat{h}(x_2)$ con $\hat{h}(x_1)$ dado por (2.5) (más precisamente, sus formas adimensionalizadas \hat{h} obtenidas en Capítulo 2.2 son utilizadas).

En este contexto, la “perturbación” está dada por la interacción pseudo-coulombiana de la ecuación (2.14). La condición de conservación de la energía derivada anteriormente impone que la energía del electrón emitido sea

$$E_c = E_2 + E_3 - E_1 = 99,3meV$$

Luego, a partir de la (1.6) tenemos que el tiempo de decaimiento de resonancia está dado por

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \Psi_{fin}(x_1, x_2) | \hat{V}_{int}(x_1, x_2) | \Psi_{inic}(x_1, x_2) \rangle|^2 \rho_1(E_c) \quad (6.5)$$

donde ρ_1 representa la densidad de estados de una sola partícula como se presenta en [Gol+15] y las referencias que se encuentran allí.

En la Fig. 6.3 se presentan los tiempos de decaimiento calculados utilizando los métodos dependientes e independientes del tiempo para los estados singlete y triplete.

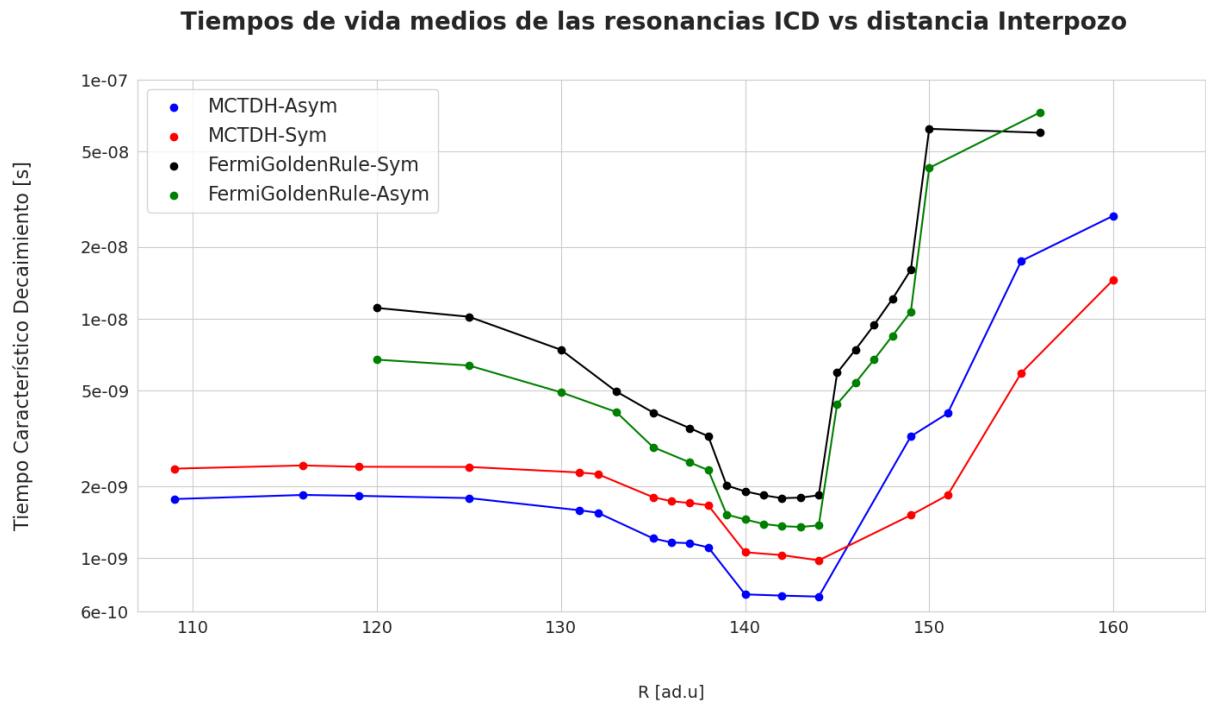


Figura 6.3: Tiempos de vida de resonancias Feshbach del sistema de dos electrones interactuantes calculados con método dependientes e independientes del tiempo para los estados singlete y triplete en función de la distancia inter-poza “ d ”

Se ha demostrado experimental y teóricamente que el ICD es fuertemente dependiente de las distancias entre los “átomos” involucrados [Öhr+04] [AMC04], en ese sentido, mientras mayor sea la distancia interatómica, menos eficiente será el proceso; y para distancias grandes, se observa un comportamiento asintótico:

$$\Gamma^{-1} = \tau(d) \sim d^6 \quad (6.6)$$

Sin embargo, la (6.5) sugiere que el tiempo de decaimiento puede reducirse si:

- Se tiene una gran cantidad de estados en un entorno de la energía E_c
- Si la función de onda ϕ_{E_c} permite un acople mayor entre los estados ligados involucrados

Ambas condiciones se satisfacen cuando el estado del electrón emitido es una de las resonancias de forma del sistema, mostradas en las Fig. 5.1 y Fig. 5.2. Ésto ocurre cuando $d \approx 140 \text{ \AA}$ como se aprecia en Fig. 5.5

En la Fig. 6.3 claramente se observa una reducción de los tiempos de decaimiento en un entorno de las distancias interatómicas antes mencionadas, tanto en los cálculos realizados con métodos dependientes como independientes del tiempo evidenciándose así *una mejoría en la eficiencia del proceso ICD, provocada por la presencia de resonancias de forma del sistema estudiado.*

Adicionalmente, en el Apéndice A se presentan los resultados obtenidos para un sistema para el cual NO se presencian marcadas resonancias de forma como en el de pozos cuadrados hasta aquí estudiado, allí se observa que los anchos característicos de las resonancias Feshbach (inversas del tiempo de decaimiento) muestran un comportamiento monótono y asintóticamente se ve la tendencia de ley de potencias (6.6).

Capítulo 7

Conclusiones y Perspectivas

En esta tesis se ha estudiado el fenómeno de decaimiento por interacción coulombiana (ICD) en sistemas de pozos cuánticos semiconductores utilizando métodos dependientes e independientes del tiempo con el objetivo principal de caracterizar estos procesos de relajación electrónica y evaluar específicamente el impacto de la presencia de resonancias de forma en la eficiencia del decaimiento ICD.

Se planteó un modelo de masa efectiva para describir dos electrones interactuando en una nanoheteroestructura de pozos cuánticos de InGaAs/InAlAs. Cada pozo cuántico se ha modelado mediante un potencial cuadrado de profundidad 500 meV y anchos de 53,96 Å y 20,05 Å y se tomaron en cuenta las diferentes movilidades electrónicas en los materiales utilizando una masa efectiva discontinua.

Para tal fin, se utilizó un método numérico de representación en variable discreta (DVR) para obtener una implementación sencilla para calcular las energías y las funciones de onda de los autoestados del sistema. Si bien los métodos espectrales DVR utilizados han resultado útiles y eficientes para describir la dinámica en virtud de la propiedad (3.11), en este problema unidimensional presentan limitaciones de precisión para representar adecuadamente discontinuidades abruptas en el potencial como se menciona en [May18], lo cual requiere utilizar bases de autofunciones de gran tamaño. Por ello, en futuros trabajos sobre este sistema modelo sería conveniente contrastar con la eficiencia de métodos variacionales cuya convergencia es más rápida, como se muestra en Fig. 3.2.

La dinámica temporal se ha simulado mediante la técnica MCTDH y se ha analizado la función de autocorrelación. El decaimiento exponencial de dicha función ha permitido caracterizar los tiempos de vida medios de las resonancias Feshbach asociadas al proceso ICD para distintas configuraciones del sistema.

Adicionalmente, se han llevado a cabo cálculos complementarios utilizando la regla de oro de Fermi a partir de la densidad de estados electrónicos. Esta metodología independiente del tiempo ha provisto una segunda estimación de los tiempos de decaimiento, la cual está en concordancia con la estimación por MCTDH.

Los resultados obtenidos ponen de manifiesto una reducción en los tiempos de decaimiento ICD cuando la energía del proceso coincide con las de resonancias de forma detectadas previamente en el sistema de un solo electrón, esto ocurre cuando las distancias inter-pozo son de aproximadamente 140 Å.

Las simulaciones dependientes del tiempo predicen tiempos característicos del orden de los nanosegundos ($\sim 10^{-9}s$), mostrando mínimos de 0,7 ns, mientras que los cálculos por regla de oro de Fermi evidencian el mismo comportamiento global pero los tiempos de decaimiento son sensiblemente superiores a los calculados dinámicamente. En términos generales, cabe destacar que se obtienen tiempos de decaimiento relativamente lentos comparados con los reportes que pueden encontrarse en la literatura para otros procesos de relajación electrónica como efecto Auger o decaimiento radiativo. Esto puede explicarse por el fuerte confinamiento de los estados

producto de los profundos pozos de potencial modelados, donde la baja superposición entre estados localizados en pozos vecinos dificulta los procesos de transferencia energética, pues en contraposición con el sistema tratado en el Apéndice (cf. Sec.A), los tiempos de vida calculados en este último son mucho menores.

En contraste, los resultados obtenidos distan ampliamente de aquellos reportados en [Gol+15] ($\tau \sim 10^{-11} s$). La principal discrepancia que encontramos con lo presentado en dicho trabajo radica en el cálculo de la densidad de estados del sistema (Figura 6 de ese trabajo), la cual es muy diferente a la reportada en Fig. 5.3, incluso mostrando picos de resonancia cuya amplitud crece para las resonancias de órdenes mayores, lo cual se contrapone al comportamiento esperado.

En conclusión, este estudio aporta conocimiento relevante sobre la competencia entre el decaimiento ICD y otros canales de relajación no radiativos en puntos cuánticos semiconductores heterogéneos. Los resultados obtenidos contribuyen a comprender los factores que controlan la eficiencia de estos procesos electrónicos y su posible optimización mediante ingeniería de nanoestructuras para encontrar nuevas configuraciones y/o materiales que puedan modelarse con pozos de menor profundidad, donde se facilitaría la transferencia entre estados y se obtendrían tiempos de decaimiento ICD más rápidos.

Este trabajo constituyó un primer paso hacia una caracterización más completa de la dinámica electrónica en procesos ICD utilizando modelos realistas de puntos cuánticos. Los resultados motivan varias líneas de investigación futura:

- Un aspecto interesante sería analizar modelos tridimensionales que capturen los grados de libertad adicionales y evaluar la robustez de las conclusiones aquí obtenidas. Asimismo, estudiar diferentes geometrías y materiales para los pozos cuánticos brindaría información sobre la dependencia de las resonancias de forma.
- Otra extensión prometedora que sería incluir un tercer electrón confinado e estudiar cómo se modifica el proceso ICD. Esto permitiría analizar efectos adicionales de correlación e interacción coulombiana así como la posibilidad de nuevos canales de decaimiento y constatar los resultados de [SLB22] para un sistema de tres pozos cuánticos unidimensionales.
- Asimismo, se podrían considerar efectos de temperatura finita o acoplamiento con fonones para analizar su impacto en la dinámica de este mismo sistema.
- Por último, se podrían explorar los efectos de considerar materiales con distintas propiedades dieléctricas y contrastar las propiedades dinámicas con aquellas obtenidas en este trabajo.

El estudio de estos aspectos permitiría obtener una caracterización más exhaustiva de los fenómenos de decaimiento en este tipo de sistemas y evaluar estrategias para optimizar la eficiencia de procesos ICD relevante en aplicaciones optoelectrónicas y de computación cuántica.

Apéndice A

Contrastación de Resultados en Sistema Pozos Gaussianos

Adicionalmente al trabajo antes desarrollado y a fin de analizar el comportamiento asintótico de los decaimientos por ICD y evaluar los programas desarrollados y utilizados, se trabajó con el sistema estudiado en [BGC11]. En dicho trabajo se utilizan los mismos métodos dependientes del tiempo desarrollados en Capítulo 4, con lo cual es posible comparar directamente los resultados obtenidos con aquellos reportados en dicha publicación.

A.1. Sistema Estudiado

El sistema estudiado consiste de dos partículas en un potencial de doble pozo gaussiano con confinamiento parabólico en las direcciones transversales. Aquí se trabajó con una versión unidimensional del mismo

$$\hat{h}(y) = \frac{1}{2} \frac{d^2}{dy^2} - D_l e^{-b_l(y+R/2)^2} - D_r e^{-b_r(y-R/2)^2} \quad (\text{A.1})$$

siendo los parámetros del potencial:

- $7,0 \text{ a.u.} \leq R \leq 20,0 \text{ a.u.}$
- $D_l = 1,0 \text{ a.u.}$, $D_r = 0,8 \text{ a.u.}$
- $b_l = 0,25 \text{ a.u.}$, $b_r = 1,0 \text{ a.u.}$

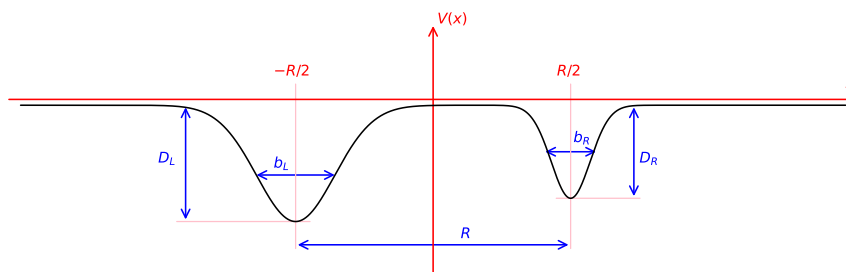


Figura A.1: Representación esquemática del potencial de pozos gaussianos que funcionan como QW. Se indican las cantidades representativas del sistema: profundidad de ambos pozos D_L , D_R , anchos de los pozos b_L , b_R y separación inter-pozo R . Los pozos se ubican en coordenadas $\pm R/2$.

Se utilizó el mismo potencial tipo-coulombiano presentado en (2.14).

En este modelo, a diferencia del de pozos cuadrados estudiado en capítulos anteriores, el hamiltoniano de (A.1) no presenta marcadas resonancias de forma en la región interpozo, como se puede observar en Fig. A.2, con lo cual esperamos un comportamiento diferente para el tiempo de decaimiento de las resonancias Feshbach del sistema de dos electrones.

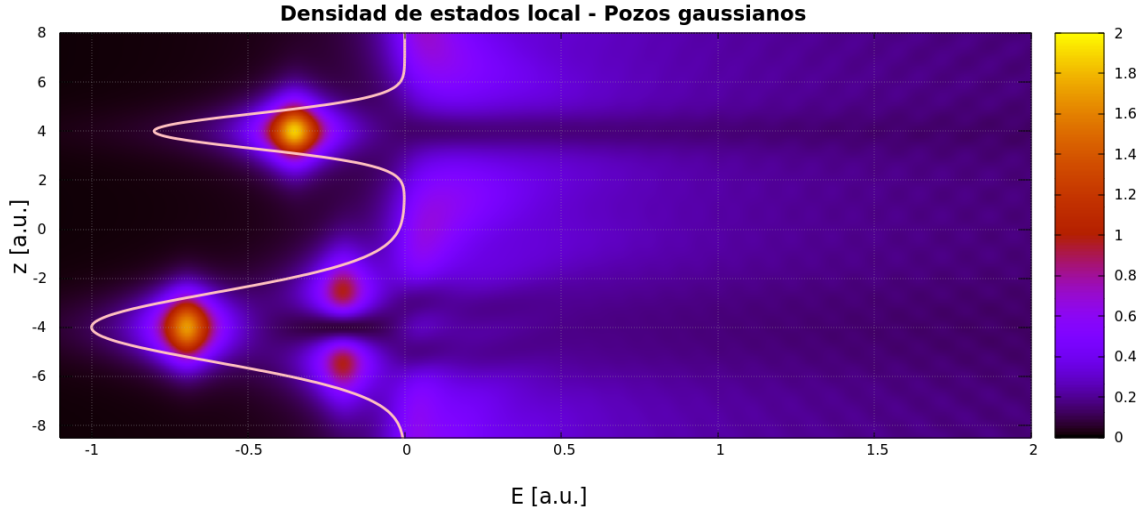


Figura A.2: LDOS para el hamiltoniano de una sola partícula. Superpuesto se encuentra el potencial de pozos gaussianos. Los estados ligados del sistema se observan claramente confinados en sus respectivos pozos, NO se observan estados resonantes claramente identificables como en Fig. 5.1

A continuación presentamos los resultados obtenidos al evaluar la autocorrelación para la evolución temporal calculada mediante MCTDH donde claramente se observa el carácter exponencial del decaimiento por ICD para diferentes distancias interpozo Fig. A.3. Además en la Tabla A.1 y Fig. A.4 se reportan los tiempos característicos calculados por ajuste de las correspondientes curvas de autocorrelación. La conversión de unidades adimensionales a unidades SI se realizó utilizando el radio de Bohr tradicional y la masa de electrón en la (2.11).

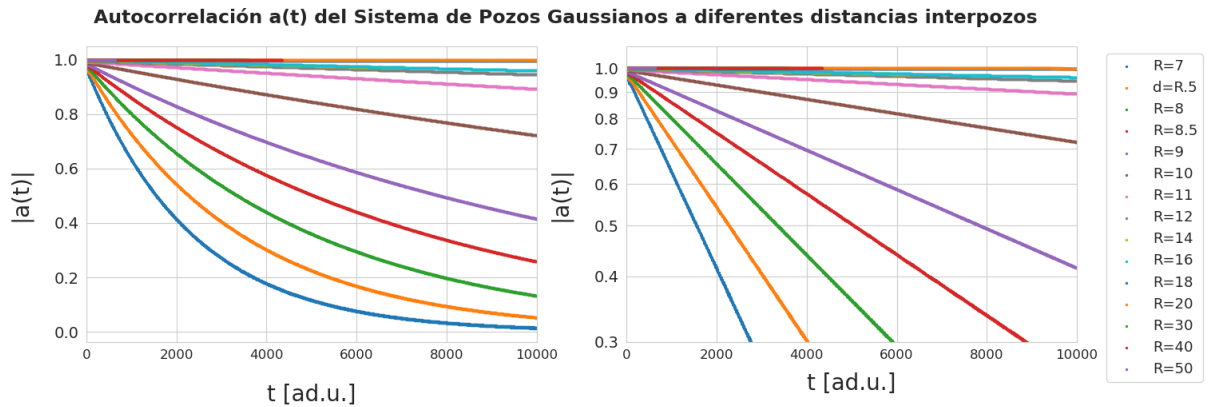


Figura A.3: Funciones de autocorrelación $a(t)$ calculadas a partir de evoluciones temporales del sistema para varias distancias inter-pozo, aquí claramente puede apreciarse el comportamiento de decaimiento exponencial mencionado en (4.20)

Estimaciones Tiempos de Decaimiento de Resonancias [fs]		
Distancia inter-pozo R [ad.u.]	Tiempo decaimiento calculado	Tiempo decaimiento reportado [BGC11]
7,0	28,52	44,06
7,5	41,26	50,17
8,0	60,38	58,14
8,5	90,42	68,45
9,0	139,91	82,01
10,0	383,08	106,33
11,0	1133	604,21
12,0	2340	4107,74
14,0	2941	5970,63
16,0	3025	5159,17
18,0	27965	4474,47
20,0	99464	95145,51

Tabla A.1: Comparativa de tiempos de decaimiento para diferentes distancias inter-pozo calculados en este trabajo con aquellos reportados en [BGC11].

V. Averbukh et al. [AMC04] reportaron un comportamiento asintótico para el ancho de resonancia Γ en el decaimiento ICD en clústeres atómicos: para distancias grandes, se sigue la tendencia

$$\Gamma(R) \sim R^{-6} \quad (\text{A.2})$$

Es interesante comparar los resultados obtenidos en este sistema de QD con el mencionado en (A.2)

Comportamiento Asintótico de los anchos de Resonancias en función de la Distancia Inter-Pozo

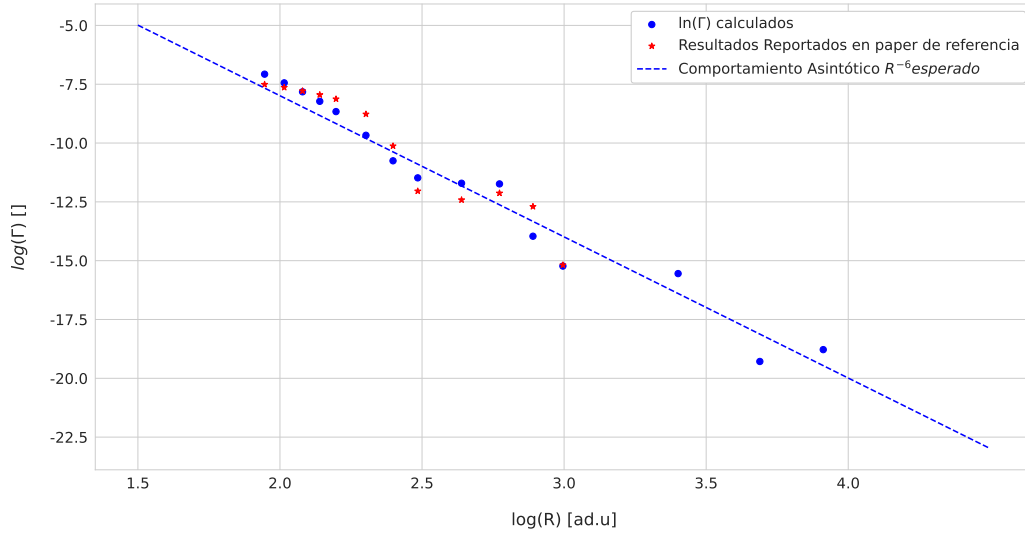


Figura A.4: Comportamiento asintótico del ancho de resonancia Γ como función de la distancia inter-pozo

Bibliografía

- [Gam28] G. Gamow. «Zur Quantentheorie des Atomkernes». En: *Zeitschrift für Physik* 51.3-4 (mar. de 1928), págs. 204-212. ISSN: 1434-6001, 1434-601X. DOI: [10.1007/BF01343196](https://doi.org/10.1007/BF01343196). URL: <http://link.springer.com/10.1007/BF01343196> (visitado 24-10-2023).
- [GC29] R. W. Gurney y E. U. Condon. «Quantum Mechanics and Radioactive Disintegration». En: *Physical Review* 33.2 (1 de feb. de 1929), págs. 127-140. ISSN: 0031-899X. DOI: [10.1103/PhysRev.33.127](https://doi.org/10.1103/PhysRev.33.127). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.33.127> (visitado 24-10-2023).
- [Sie39] A. J. F. Siegert. «On the Derivation of the Dispersion Formula for Nuclear Reactions». En: *Physical Review* 56.8 (15 de oct. de 1939), págs. 750-752. ISSN: 0031-899X. DOI: [10.1103/PhysRev.56.750](https://doi.org/10.1103/PhysRev.56.750). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.56.750> (visitado 24-10-2023).
- [HEG65] David O. Harris, Gail G. Engerholm y William D. Gwinn. «Calculation of Matrix Elements for One-Dimensional Quantum-Mechanical Problems and the Application to Anharmonic Oscillators». En: *The Journal of Chemical Physics* 43.5 (1 de sep. de 1965), págs. 1515-1517. ISSN: 0021-9606, 1089-7690. DOI: [10.1063/1.1696963](https://doi.org/10.1063/1.1696963). URL: <https://pubs.aip.org/jcp/article/43/5/1515/81899/Calculation-of-Matrix-Elements-for-One-Dimensional> (visitado 25-09-2023).
- [Art68] J. R. Arthur. «Interaction of Ga and As₂ Molecular Beams with GaAs Surfaces». En: *Journal of Applied Physics* 39.8 (1 de jul. de 1968), págs. 4032-4034. ISSN: 0021-8979, 1089-7550. DOI: [10.1063/1.1656901](https://doi.org/10.1063/1.1656901). URL: <https://pubs.aip.org/jap/article/39/8/4032/5333/Interaction-of-Ga-and-As2-Molecular-Beams-with> (visitado 13-11-2023).
- [DC68] A. S. Dickinson y P. R. Certain. «Calculation of Matrix Elements for One-Dimensional Quantum-Mechanical Problems». En: *The Journal of Chemical Physics* 49.9 (1 de nov. de 1968), págs. 4209-4211. ISSN: 0021-9606, 1089-7690. DOI: [10.1063/1.1670738](https://doi.org/10.1063/1.1670738). URL: <https://pubs.aip.org/jcp/article/49/9/4209/81885/Calculation-of-Matrix-Elements-for-One-Dimensional> (visitado 25-09-2023).
- [BC71] E. Balslev y J. M. Combes. «Spectral Properties of Many-Body Schrödinger Operators with Dilatation-Analytic Interactions». En: *Communications in Mathematical Physics* 22.4 (dic. de 1971), págs. 280-294. ISSN: 0010-3616, 1432-0916. DOI: [10.1007/BF01877511](https://doi.org/10.1007/BF01877511). URL: <http://link.springer.com/10.1007/BF01877511> (visitado 24-10-2023).
- [Cho71] A. Y. Cho. «Film Deposition by Molecular-Beam Techniques». En: *Journal of Vacuum Science and Technology* 8.5 (1 de sep. de 1971), S31-S38. ISSN: 0022-5355. DOI: [10.1116/1.1316387](https://doi.org/10.1116/1.1316387). URL: <https://pubs.aip.org/jvst/article/8/5/S31/249382/Film-Deposition-by-Molecular-Beam-Techniques> (visitado 13-11-2023).

- [Eli+72] M.I. Elinson et al. «Quantum Size Effect and Perspectives of Its Practical Application». En: *Thin Solid Films* 12.2 (oct. de 1972), págs. 383-397. ISSN: 00406090. DOI: [10.1016/0040-6090\(72\)90102-2](https://doi.org/10.1016/0040-6090(72)90102-2). URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0040609072901022> (visitado 13-11-2023).
- [Sim73] Barry Simon. «Resonances in N-Body Quantum Systems With Dilatation Analytic Potentials and the Foundations of Time-Dependent Perturbation Theory». En: *The Annals of Mathematics* 97.2 (mar. de 1973), pág. 247. ISSN: 0003486X. DOI: [10.2307/1970847](https://doi.org/10.2307/1970847). JSTOR: [1970847](https://www.jstor.org/stable/1970847?origin=crossref). URL: <https://www.jstor.org/stable/1970847?origin=crossref> (visitado 24-10-2023).
- [Per80] Asher Peres. «Nonexponential Decay Law». En: *Annals of Physics* 129.1 (oct. de 1980), págs. 33-46. ISSN: 00034916. DOI: [10.1016/0003-4916\(80\)90288-2](https://doi.org/10.1016/0003-4916(80)90288-2). URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/0003491680902882> (visitado 22-10-2023).
- [EO81] A. Ekimov y Alexey Onushcheko. «Quantum Size Effect in Three-Dimensional Microscopic Semiconductor Crystals». En: *ZhETF Pis ma Redaktsiu* 34 (31 de ago. de 1981), pág. 363.
- [Goe+83] K. Goeke et al. «Time Dependent Hartree-Fock and Beyond». En: *Progress of Theoretical Physics Supplement* 74 (1983), págs. 33-65. ISSN: 0375-9687. DOI: [10.1143/PTPS.74.33](https://doi.org/10.1143/PTPS.74.33). URL: <https://academic.oup.com/ptps/article-lookup/doi/10.1143/PTPS.74.33> (visitado 25-09-2023).
- [EEO85] A.I. Ekimov, Al.L. Efros y A.A. Onushchenko. «Quantum Size Effect in Semiconductor Microcrystals». En: *Solid State Communications* 56.11 (dic. de 1985), págs. 921-924. ISSN: 00381098. DOI: [10.1016/S0038-1098\(85\)80025-9](https://doi.org/10.1016/S0038-1098(85)80025-9). URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0038109885800259> (visitado 20-10-2023).
- [Bah+88] Thomas B. Bahder et al. «Local Density of States in Double-Barrier Resonant-Tunneling Structures». En: *Physical Review B* 37.11 (15 de abr. de 1988), págs. 6256-6261. ISSN: 0163-1829. DOI: [10.1103/PhysRevB.37.6256](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.37.6256). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.37.6256> (visitado 24-10-2023).
- [Nau90] M Nauenberg. «Autocorrelation Function and Quantum Recurrence of Wavepackets». En: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 23.15 (14 de ago. de 1990), págs. L385-L390. ISSN: 0953-4075, 1361-6455. DOI: [10.1088/0953-4075/23/15/001](https://doi.org/10.1088/0953-4075/23/15/001). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-4075/23/15/001> (visitado 12-10-2023).
- [AK91] Hiromitsu Asai y Yuichi Kawamura. «Intersubband Absorption in In 0.53 Ga 0.47 As/ In 0.52 Al 0.48 As Multiple Quantum Wells». En: *Physical Review B* 43.6 (15 de feb. de 1991), págs. 4748-4759. ISSN: 0163-1829, 1095-3795. DOI: [10.1103/PhysRevB.43.4748](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.43.4748). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.43.4748> (visitado 15-10-2023).
- [FT91] Ronald S. Friedman y Donald G. Truhlar. «Chemical Reaction Thresholds Are Resonances». En: *Chemical Physics Letters* 183.6 (sep. de 1991), págs. 539-546. ISSN: 00092614. DOI: [10.1016/0009-2614\(91\)80172-T](https://doi.org/10.1016/0009-2614(91)80172-T). URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/000926149180172T> (visitado 24-10-2023).
- [RM96] U. V. Riss y H.-D. Meyer. «Investigation on the Reflection and Transmission Properties of Complex Absorbing Potentials». En: *The Journal of Chemical Physics* 105.4 (22 de jul. de 1996), págs. 1409-1419. ISSN: 0021-9606, 1089-7690. DOI: [10.1063/1.472003](https://doi.org/10.1063/1.472003). URL: <https://pubs.aip.org/jcp/article/105/4/1409/181268/Investigation-on-the-reflection-and-transmission> (visitado 22-10-2023).

- [CZT97] L. S. Cederbaum, J. Zobeley y F. Tarantelli. «Giant Intermolecular Decay and Fragmentation of Clusters». En: *Physical Review Letters* 79.24 (15 de dic. de 1997), págs. 4778-4781. ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: [10.1103/PhysRevLett.79.4778](https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.79.4778). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.79.4778> (visitado 24-09-2023).
- [JWH98] Lucjan Jacak, Arkadiusz Wójs y Paweł Hawrylak. *Quantum Dots*. Berlin, Heidelberg: Springer Berlin Heidelberg, 1998. DOI: [10.1007/978-3-642-72002-4](https://doi.org/10.1007/978-3-642-72002-4). URL: <http://link.springer.com/10.1007/978-3-642-72002-4> (visitado 25-09-2023).
- [LD98] Daniel Loss y David P. DiVincenzo. «Quantum Computation with Quantum Dots». En: *Physical Review A* 57.1 (1 de ene. de 1998), págs. 120-126. ISSN: 1050-2947, 1094-1622. DOI: [10.1103/PhysRevA.57.120](https://doi.org/10.1103/PhysRevA.57.120). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.57.120> (visitado 20-10-2023).
- [Moi98] N Moiseyev. «Quantum Theory of Resonances: Calculating Energies, Widths and Cross-Sections by Complex Scaling». En: *Physics Reports* 302.5-6 (1 de sep. de 1998), págs. 212-293. ISSN: 03701573. DOI: [10.1016/S0370-1573\(98\)00002-7](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(98)00002-7). URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0370157398000027> (visitado 24-09-2023).
- [FB99] R. Ferreira y G. Bastard. «Phonon-Assisted Capture and Intradot Auger Relaxation in Quantum Dots». En: *Applied Physics Letters* 74.19 (10 de mayo de 1999), págs. 2818-2820. ISSN: 0003-6951, 1077-3118. DOI: [10.1063/1.124024](https://doi.org/10.1063/1.124024). URL: <https://pubs.aip.org/apl/article/74/19/2818/74132/Phonon-assisted-capture-and-intradot-auger> (visitado 19-10-2023).
- [Guy+99] Philippe Guyot-Sionnest et al. «Intraband Relaxation in CdSe Quantum Dots». En: *Physical Review B* 60.4 (15 de jul. de 1999), R2181-R2184. ISSN: 0163-1829, 1095-3795. DOI: [10.1103/PhysRevB.60.R2181](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.60.R2181). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.R2181> (visitado 24-09-2023).
- [Bec00] M Beck. «The Multiconfiguration Time-Dependent Hartree (MCTDH) Method: A Highly Efficient Algorithm for Propagating Wavepackets». En: *Physics Reports* 324.1 (ene. de 2000), págs. 1-105. ISSN: 03701573. DOI: [10.1016/S0370-1573\(99\)00047-2](https://doi.org/10.1016/S0370-1573(99)00047-2). URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0370157399000472> (visitado 25-09-2023).
- [Mic+00] P. Michler et al. «A Quantum Dot Single-Photon Turnstile Device». En: *Science* 290.5500 (22 de dic. de 2000), págs. 2282-2285. ISSN: 0036-8075, 1095-9203. DOI: [10.1126/science.290.5500.2282](https://doi.org/10.1126/science.290.5500.2282). URL: <https://www.science.org/doi/10.1126/science.290.5500.2282> (visitado 20-10-2023).
- [Raa00] A. Raab. «On the Dirac–Frenkel/McLachlan Variational Principle». En: *Chemical Physics Letters* 319.5-6 (mar. de 2000), págs. 674-678. ISSN: 00092614. DOI: [10.1016/S0009-2614\(00\)00200-1](https://doi.org/10.1016/S0009-2614(00)00200-1). URL: <https://linkinghub.elsevier.com/retrieve/pii/S0009261400002001> (visitado 25-09-2023).
- [VMR01] I. Vurgaftman, J. R. Meyer y L. R. Ram-Mohan. «Band Parameters for III–V Compound Semiconductors and Their Alloys». En: *Journal of Applied Physics* 89.11 (1 de jun. de 2001), págs. 5815-5875. ISSN: 0021-8979, 1089-7550. DOI: [10.1063/1.1368156](https://doi.org/10.1063/1.1368156). URL: <https://pubs.aip.org/jap/article/89/11/5815/488612/Band-parameters-for-III-V-compound-semiconductors> (visitado 15-10-2023).
- [Bed+03] S. Bednarek et al. «Effective Interaction for Charge Carriers Confined in Quasi-One-Dimensional Nanostructures». En: *Physical Review B* 68.4 (30 de jul. de 2003), pág. 045328. ISSN: 0163-1829, 1095-3795. DOI: [10.1103/PhysRevB.68.045328](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.68.045328). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.68.045328> (visitado 23-11-2023).

- [SCM03] S. Scheit, L. S. Cederbaum y H.-D. Meyer. «Time-Dependent Interplay between Electron Emission and Fragmentation in the Interatomic Coulombic Decay». En: *The Journal of Chemical Physics* 118.5 (1 de feb. de 2003), págs. 2092-2107. ISSN: 0021-9606, 1089-7690. DOI: [10.1063/1.1531996](https://pubs.aip.org/jcp/article/118/5/2092/445908/Time-dependent-interplay-between-electron-emission). URL: <https://pubs.aip.org/jcp/article/118/5/2092/445908/Time-dependent-interplay-between-electron-emission> (visitado 27-10-2023).
- [AMC04] Vitali Averbukh, Imke B. Müller y Lorenz S. Cederbaum. «Mechanism of Interatomic Coulombic Decay in Clusters». En: *Physical Review Letters* 93.26 (20 de dic. de 2004), pág. 263002. ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: [10.1103/PhysRevLett.93.263002](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.263002). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.263002> (visitado 01-11-2023).
- [Jah+04] T. Jahnke et al. «Experimental Observation of Interatomic Coulombic Decay in Neon Dimers». En: *Physical Review Letters* 93.16 (13 de oct. de 2004), pág. 163401. ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: [10.1103/PhysRevLett.93.163401](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.163401). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.163401> (visitado 27-10-2023).
- [KH04] Sabyasachi Kar e Y K Ho. «S-Wave Resonances in $e^+ - \text{He}$ Scattering below the Ps ($n = 2$) Excitation Threshold». En: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 37.15 (14 de ago. de 2004), págs. 3177-3186. ISSN: 0953-4075, 1361-6455. DOI: [10.1088/0953-4075/37/15/012](https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-4075/37/15/012). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-4075/37/15/012> (visitado 07-11-2023).
- [Öhr+04] G. Öhrwall et al. «Femtosecond Interatomic Coulombic Decay in Free Neon Clusters: Large Lifetime Differences between Surface and Bulk». En: *Physical Review Letters* 93.17 (19 de oct. de 2004), pág. 173401. ISSN: 0031-9007, 1079-7114. DOI: [10.1103/PhysRevLett.93.173401](https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.173401). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.173401> (visitado 19-11-2023).
- [Har05] Paul Harrison. *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*. 1.^a ed. Wiley, 15 de jul. de 2005. DOI: [10.1002/0470010827](https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/0470010827). URL: <https://onlinelibrary.wiley.com/doi/book/10.1002/0470010827> (visitado 16-10-2023).
- [Med+05] Igor L. Medintz et al. «Quantum Dot Bioconjugates for Imaging, Labelling and Sensing». En: *Nature Materials* 4.6 (1 de jun. de 2005), págs. 435-446. ISSN: 1476-1122, 1476-4660. DOI: [10.1038/nmat1390](https://www.nature.com/articles/nmat1390). URL: <https://www.nature.com/articles/nmat1390> (visitado 20-10-2023).
- [Bha06] Pallab Bhattacharya. *Properties of Lattice-Matched and Strained Indium Gallium Arsenide*. London: The Institution of Engineering and Technology, 2006. ISBN: 978-0-86341-662-0.
- [Kam08] Prashant V. Kamat. «Quantum Dot Solar Cells. Semiconductor Nanocrystals as Light Harvesters». En: *The Journal of Physical Chemistry C* 112.48 (4 de dic. de 2008), págs. 18737-18753. ISSN: 1932-7447, 1932-7455. DOI: [10.1021/jp806791s](https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp806791s). URL: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jp806791s> (visitado 20-10-2023).
- [Zet09] Nouredine Zettili. *Quantum Mechanics: Concepts and Applications*. 2nd ed. Chichester, U.K: Wiley, 2009. 671 págs.
- [Jah+10] T. Jahnke et al. «Ultrafast Energy Transfer between Water Molecules». En: *Nature Physics* 6.2 (feb. de 2010), págs. 139-142. ISSN: 1745-2473, 1745-2481. DOI: [10.1038/nphys1498](https://www.nature.com/articles/nphys1498). URL: <https://www.nature.com/articles/nphys1498> (visitado 24-09-2023).

- [POS10] Federico M Pont, Omar Osenda y Pablo Serra. «The Scaling of the Density of States in Systems with Resonance States». En: *Physica Scripta* 82.3 (sep. de 2010), pág. 038104. ISSN: 0031-8949, 1402-4896. DOI: [10.1088/0031-8949/82/03/038104](https://doi.org/10.1088/0031-8949/82/03/038104). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0031-8949/82/03/038104> (visitado 26-10-2023).
- [Sal+10] J Salfi et al. «Electronic Properties of Quantum Dot Systems Realized in Semiconductor Nanowires». En: *Semiconductor Science and Technology* 25.2 (1 de feb. de 2010), pág. 024007. ISSN: 0268-1242, 1361-6641. DOI: [10.1088/0268-1242/25/2/024007](https://doi.org/10.1088/0268-1242/25/2/024007). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0268-1242/25/2/024007> (visitado 23-11-2023).
- [Sis+10] Nicolas Sisourat et al. «Ultralong-Range Energy Transfer by Interatomic Coulombic Decay in an Extreme Quantum System». En: *Nature Physics* 6.7 (jul. de 2010), págs. 508-511. ISSN: 1745-2473, 1745-2481. DOI: [10.1038/nphys1685](https://doi.org/10.1038/nphys1685). URL: <https://www.nature.com/articles/nphys1685> (visitado 24-09-2023).
- [BGC11] Annika Bande, Kirill Gokhberg y Lorenz S. Cederbaum. «Dynamics of Interatomic Coulombic Decay in Quantum Dots». En: *The Journal of Chemical Physics* 135.14 (14 de oct. de 2011), pág. 144112. ISSN: 0021-9606, 1089-7690. DOI: [10.1063/1.3646205](https://doi.org/10.1063/1.3646205). URL: <https://pubs.aip.org/jcp/article/135/14/144112/190304/Dynamics-of-interatomic-Coulombic-decay-in-quantum> (visitado 25-09-2023).
- [CM11] Ira Cherkes y Nimrod Moiseyev. «Electron Relaxation in Quantum Dots by the Interatomic Coulombic Decay Mechanism». En: *Physical Review B* 83.11 (14 de mar. de 2011), pág. 113303. ISSN: 1098-0121, 1550-235X. DOI: [10.1103/PhysRevB.83.113303](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.83.113303). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.113303> (visitado 24-09-2023).
- [Han11] Meyer Hans-Dieter. *Introduction to MCTDH*. Lecture Notes. Das Physikalisch-Chemische Institut Universität Heidelberg, jul. de 2011.
- [Moi11] Nimrod Moiseyev. *Non-Hermitian Quantum Mechanics*. Cambridge: Cambridge University Press, 2011. ISBN: 978-0-511-99315-2.
- [Her12] Uwe Hergenbahn. «Production of Low Kinetic Energy Electrons and Energetic Ion Pairs by Intermolecular Coulombic Decay». En: *International Journal of Radiation Biology* 88.12 (dic. de 2012), págs. 871-883. ISSN: 0955-3002, 1362-3095. DOI: [10.3109/09553002.2012.698031](https://doi.org/10.3109/09553002.2012.698031). URL: <http://www.tandfonline.com/doi/full/10.3109/09553002.2012.698031> (visitado 24-09-2023).
- [AS13] Milton Abramowitz e Irene A. Stegun, eds. *Handbook of Mathematical Functions: With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. 9. Dover print.; [Nachdr. der Ausg. von 1972]. Dover Books on Mathematics. New York, NY: Dover Publ, 2013. 1046 págs. ISBN: 978-0-486-61272-0.
- [Har+13] Philipp H. P. Harbach et al. «Intermolecular Coulombic Decay in Biology: The Initial Electron Detachment from FADH⁻ in DNA Photolyases». En: *The Journal of Physical Chemistry Letters* 4.6 (21 de mar. de 2013), págs. 943-949. ISSN: 1948-7185, 1948-7185. DOI: [10.1021/jz400104h](https://doi.org/10.1021/jz400104h). URL: <https://pubs.acs.org/doi/10.1021/jz400104h> (visitado 24-09-2023).
- [Sha14] Shankar, Ravi. *Principles of Quantum Mechanics*. Springer Verlag, 2014. ISBN: 978-1-4615-7675-4.
- [Gol+15] Tamar Goldzak et al. «Interatomic Coulombic Decay in Two Coupled Quantum Wells». En: *Physical Review B* 91.16 (29 de abr. de 2015), pág. 165312. ISSN: 1098-0121, 1550-235X. DOI: [10.1103/PhysRevB.91.165312](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.91.165312). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.91.165312> (visitado 24-09-2023).

- [PS15] Federico M. Pont y Pablo Serra. «Comment on “Point Charge in a Three-Dielectric Medium with Planar Interfaces” [Am. J. Phys. **46**, 1172–1179 (1978)]». En: *American Journal of Physics* 83.5 (1 de mayo de 2015), págs. 475–476. ISSN: 0002-9505, 1943-2909. DOI: [10.1119/1.4907259](https://doi.org/10.1119/1.4907259). URL: <https://pubs.aip.org/ajp/article/83/5/475/1056932/Comment-on-Point-charge-in-a-three-dielectric> (visitado 24-11-2023).
- [Gol+16] Tamar Goldzak et al. «Vertical Currents Due to Interatomic Coulombic Decay in Experiments with Two Coupled Quantum Wells». En: *Physical Review B* 93.4 (20 de ene. de 2016), pág. 045310. ISSN: 2469-9950, 2469-9969. DOI: [10.1103/PhysRevB.93.045310](https://doi.org/10.1103/PhysRevB.93.045310). URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.93.045310> (visitado 24-11-2023).
- [PBC16] Federico M Pont, Annika Bande y Lorenz S Cederbaum. «Electron-Correlation Driven Capture and Release in Double Quantum Dots». En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 28.7 (24 de feb. de 2016), pág. 075301. ISSN: 0953-8984, 1361-648X. DOI: [10.1088/0953-8984/28/7/075301](https://doi.org/10.1088/0953-8984/28/7/075301). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0953-8984/28/7/075301> (visitado 23-11-2023).
- [BC17] Victor Barsan y Mihaela-Cristina Ciornei. «Semiconductor Quantum Wells with BenDaniel–Duke Boundary Conditions: Approximate Analytical Results». En: *European Journal of Physics* 38.1 (1 de ene. de 2017), pág. 015407. ISSN: 0143-0807, 1361-6404. DOI: [10.1088/0143-0807/38/1/015407](https://doi.org/10.1088/0143-0807/38/1/015407). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/0143-0807/38/1/015407> (visitado 25-09-2023).
- [Gar17] Javier García. «Cálculo de estados ligados y resonancias de sistemas de interés físicoquímico». Doctor en Ciencias Exactas, área Química. Universidad Nacional de La Plata, 14 de mar. de 2017. DOI: [10.35537/10915/59235](https://doi.org/10.35537/10915/59235). URL: <http://sedici.unlp.edu.ar/handle/10915/59235> (visitado 24-10-2023).
- [Han17] Meyer Hans-Dieter. *Numerical Methods of Quantum Dynamics - Discrete Variable Representation (DVR) Integrators*. Lecture Notes. Das Physikalisches-Chemisches Institut Universität Heidelberg, abr. de 2017.
- [EE18] D. E. Edmunds y W. D. Evans. *Spectral Theory and Differential Operators*. Second edition. Oxford Science Publications. Oxford: Oxford University Press, 2018. 589 págs. ISBN: 978-0-19-881205-0.
- [GPO18] Mariano Garagiola, Federico M Pont y Omar Osenda. «Binding of Two-Electron Metastable States in Semiconductor Quantum Dots under a Magnetic Field». En: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 51.7 (14 de abr. de 2018), pág. 075504. ISSN: 0953-4075, 1361-6455. DOI: [10.1088/1361-6455/aab1a0](https://doi.org/10.1088/1361-6455/aab1a0). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6455/aab1a0> (visitado 13-11-2023).
- [May18] Santiago Mayorga. «Un enfoque dinámico a la captura electrónica en puntos cuánticos acoplados en nanohilos». Trabajo Final Licenciatura en Física. Universidad Nacional de Córdoba, 2018. 58 págs. URL: <https://rdu.unc.edu.ar/handle/11086/6899>.
- [Web18] Marvin J. Weber. *Handbook of Optical Materials*. 0.^a ed. CRC Press, 8 de oct. de 2018. ISBN: 978-1-315-21961-5. DOI: [10.1201/9781315219615](https://doi.org/10.1201/9781315219615). URL: <https://www.taylorfrancis.com/books/9781420050196> (visitado 16-10-2023).
- [Jah+20] Till Jahnke et al. «Interatomic and Intermolecular Coulombic Decay». En: *Chemical Reviews* 120.20 (28 de oct. de 2020), págs. 11295–11369. ISSN: 0009-2665. DOI: [10.1021/acs.chemrev.0c00106](https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c00106). URL: <https://doi.org/10.1021/acs.chemrev.0c00106> (visitado 01-11-2023).

- [Yeo+20] Hyeonwoo Yeo et al. «First-Principles-Derived Effective Mass Approximation for the Improved Description of Quantum Nanostructures». En: *Journal of Physics: Materials* 3.3 (1 de jul. de 2020), pág. 034012. ISSN: 2515-7639. DOI: [10.1088/2515-7639/ab9b61](https://doi.org/10.1088/2515-7639/ab9b61). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/2515-7639/ab9b61> (visitado 27-10-2023).
- [AM21] Neil W. Ashcroft y N. David Mermin. *Solid State Physics*. Boston, MA: Cengage, 2021. 826 págs. ISBN: 978-0-357-67081-1.
- [HV22] Meyer Hans-Dieter y O. Vendrell. «The MCTDH Package, Version 8.6 (2022). Contain the ML-MCTDH Algorithm.» Pat. 2022.
- [SLB22] Joana-Lysiane Schäfer, Fabian Langkabel y Annika Bande. «Three-Electron Dynamics of the Interparticle Coulombic Decay in Doubly Excited Clusters with One-Dimensional Continuum Confinement». En: *Molecules* 27.24 (9 de dic. de 2022), pág. 8713. ISSN: 1420-3049. DOI: [10.3390/molecules27248713](https://doi.org/10.3390/molecules27248713). URL: <https://www.mdpi.com/1420-3049/27/24/8713> (visitado 13-11-2023).
- [Ban+23] Annika Bande et al. «Interatomic Coulombic Electron Capture: The Story so Far». En: *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics* 56.23 (14 de dic. de 2023), pág. 232001. ISSN: 0953-4075, 1361-6455. DOI: [10.1088/1361-6455/ad073c](https://doi.org/10.1088/1361-6455/ad073c). URL: <https://iopscience.iop.org/article/10.1088/1361-6455/ad073c> (visitado 13-11-2023).