Dinámica cuántica electrónica en puntos cuánticos de heteroestructuras semiconductoras inducida por campo láser

FAMAF
UNC
CONICET
IFEG

Martin Mendez†,1,2, Javier F. Duarte[2], Annika Bande[3,4] y Federico M. Pont‡,1,2

[1] Grupo de Teoría de la Materia Condensada (GTMC). Instituto de Física Enrique Gaviola (IFEG-CONICET)
[2] Facultad de Matemática, Astronomía, Física y Computación (FAMAF). Universidad Nacional de Córdoba (UNC).
[3] Helmholtz-Zetrum Berlin für Materialien und Energie GmbH, Berlin, Germany.
[4] PhoenixD Excellenz Cluster, Leibniz University Hannover, Hannover, Germany.

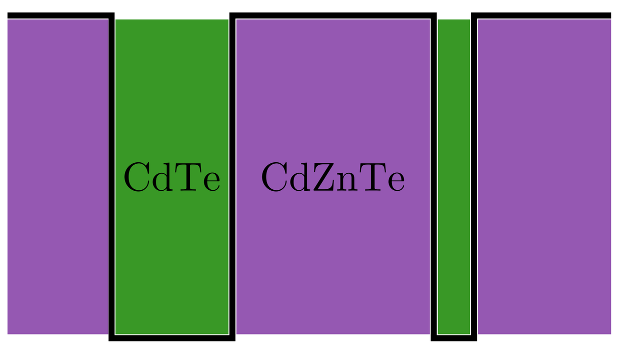
(†) martinmendez@unc.edu.ar
(‡) pont.federico@unc.edu.ar

X Reunión Nacional de Sólidos (Sólidos '25, Centro Atómico Bariloche)

Motivación y objetivo

Los procesos Inter Coulombic Decay (ICD) e Inter Coulombic Electronic Capture (ICEC) son mecánismos inelásticos mediados por correlación electrónica en sistemas moleculares acoplados. Ambos han sido caracterizados en modelos de puntos cuánticos apareados (PQDs) usando aproximaciones de masa efectiva [1,2], mostrando ser competitivos frente a otros procesos cuando la separación entre los QDs es óptima. Este trabajo estudia la dinámica cuántica de electrones interactuantes en un par de PQDs, fabricados en una heteroestructura vertical de CdTe/CdZnTe. El modelo utilizado considera una sola banda [3] y masas efectivas diferentes según el material. En particular, se estudia el proceso ICD inducido por un láser, explorando el rol de los estados resonantes de un electrón en la densidad de estados del sistema. Esta densidad de estados, y en consecuencia la eficiencia de los procesos, depende del espesor de la capa intermedia del semiconductor. Similar al enfoque utilizado para ICEC [4], se cuantifica el entrelazamiento electrónico mediante la entropía de von Neumann evaluando su correlación con la dinámica. La dinámica se simula resolviendo la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo (TDSE) mediante el principio variacional de Dirac-Frenkel, implementado con el método de Representación de Variables Discretas (DVR) en el paquete MCTDH-Heidelberg [5]. Los resultados aportan insights fundamentales para el diseño de dispositivos semiconductores nanoscópicos basados en acoplamiento electrónico Coulombiano.

Modelo de la heteroestructura



BenDaniel-Duke boundary conditions

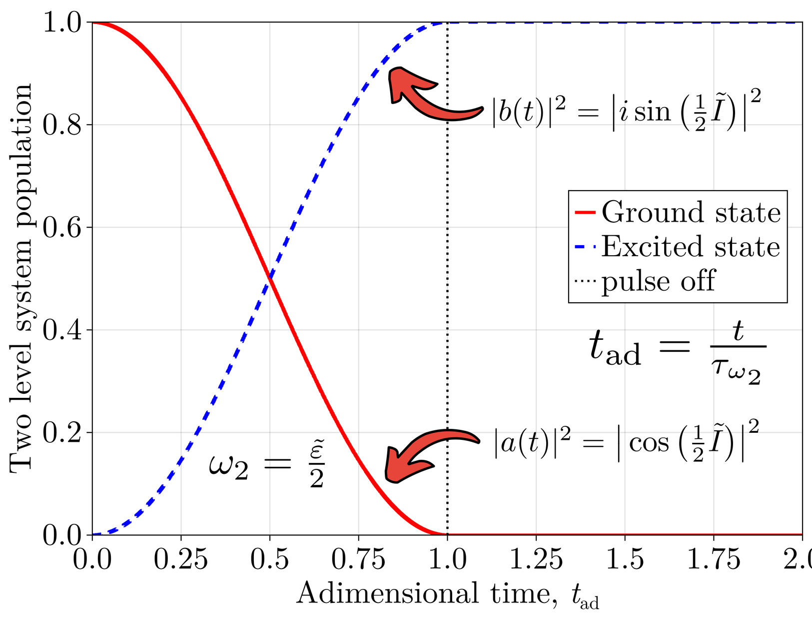
$$\hat{T}_{1e}(x) = \frac{1}{2}\hat{P}(x)\frac{1}{m_{\text{eff}}(x)}\hat{P}(x)$$

$$\frac{1}{m_{\text{eff}}(x_i^+)}\frac{d\psi}{dx}\Big|_{x_i^+} = \frac{1}{m_{\text{eff}}(x_i^-)}\frac{d\psi}{dx}\Big|_{x_i^-}$$

$$\tilde{I} = \int_0^t \tilde{\Omega}(t')dt' \rightarrow \text{Pulse area theorem}$$

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{\mu\varepsilon}{\hbar};\ \tilde{\Omega}(t) = \tilde{\varepsilon} f(t) \rightarrow \text{Rabi frecuency}$$

$$\begin{aligned}
V(t) &= -\mu_{ab}E(t) \rightarrow \text{Dipole interaction}\\
E(t) &= \varepsilon\cos(\omega_1 t)f(t) \rightarrow \text{Electric field}\\
f(t) &= \sin^2(\omega_2 t)\Theta(\tau_{\omega_2} - t);\ \tau_{\omega_2} = \frac{\pi}{\omega_2}\\
\mu_{ab} &= \langle\phi_a^e|\hat{x}|\phi_b^e\rangle \rightarrow \text{Electric dipole moment}\\
&\sim 0.56\ \text{(a.u.)}
\end{aligned}$$



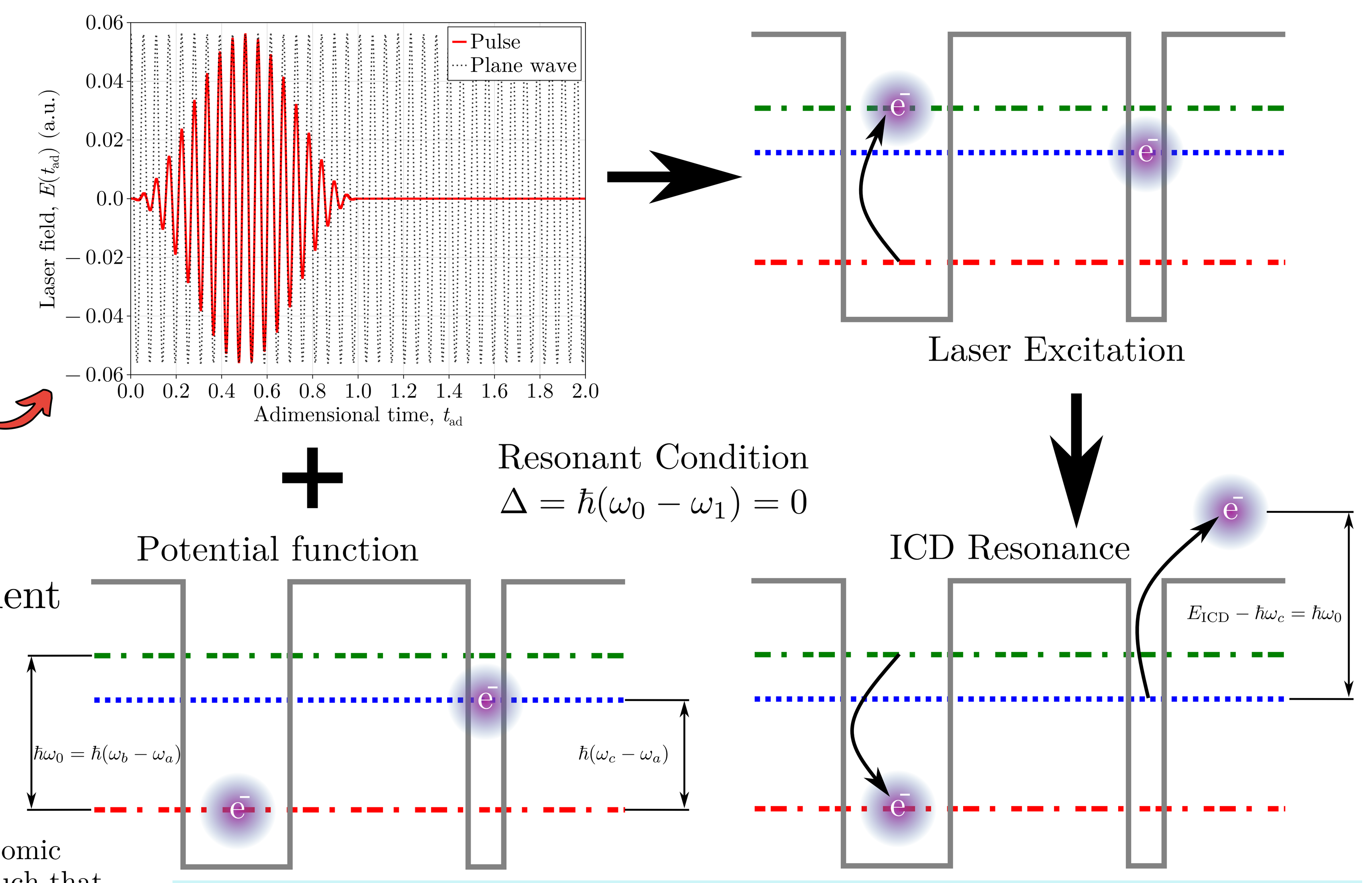
$$\begin{aligned}
\text{Energy (meV)} &= 29.932\ \frac{\text{(meV)}}{\text{(a.u.)}} \times \text{Energy (a.u.)}\\
\text{Time (fs)} &= 138.166\ \frac{\text{(fs)}}{\text{(a.u.)}} \times \text{Time (a.u.)}\\
\text{Length (nm)} &= 4.810\ \frac{\text{(nm)}}{\text{(a.u.)}} \times \text{Length (a.u.)}
\end{aligned}$$

Units conversion

The effective atomic units (a.u.) is such that

$$a_0^* = a_0\frac{\varepsilon_r}{m^*_{\text{eff}}}$$

$$E^* = E_{\text{Hartree}}\frac{m^*_{\text{eff}}}{(\varepsilon_r)^2}$$



Parameter	CdTe	$Cd_{0.75}Zn_{0.25}Te$	Units
Effective mass, m^*_{eff}	0.11	0.142	in units of electorn mass m_e
Effective Bohr radius, a_0^*	4.809	37.253	in nanometers
Relative dielectric constant, ε_r	10	10	in units of laser amplitud ε

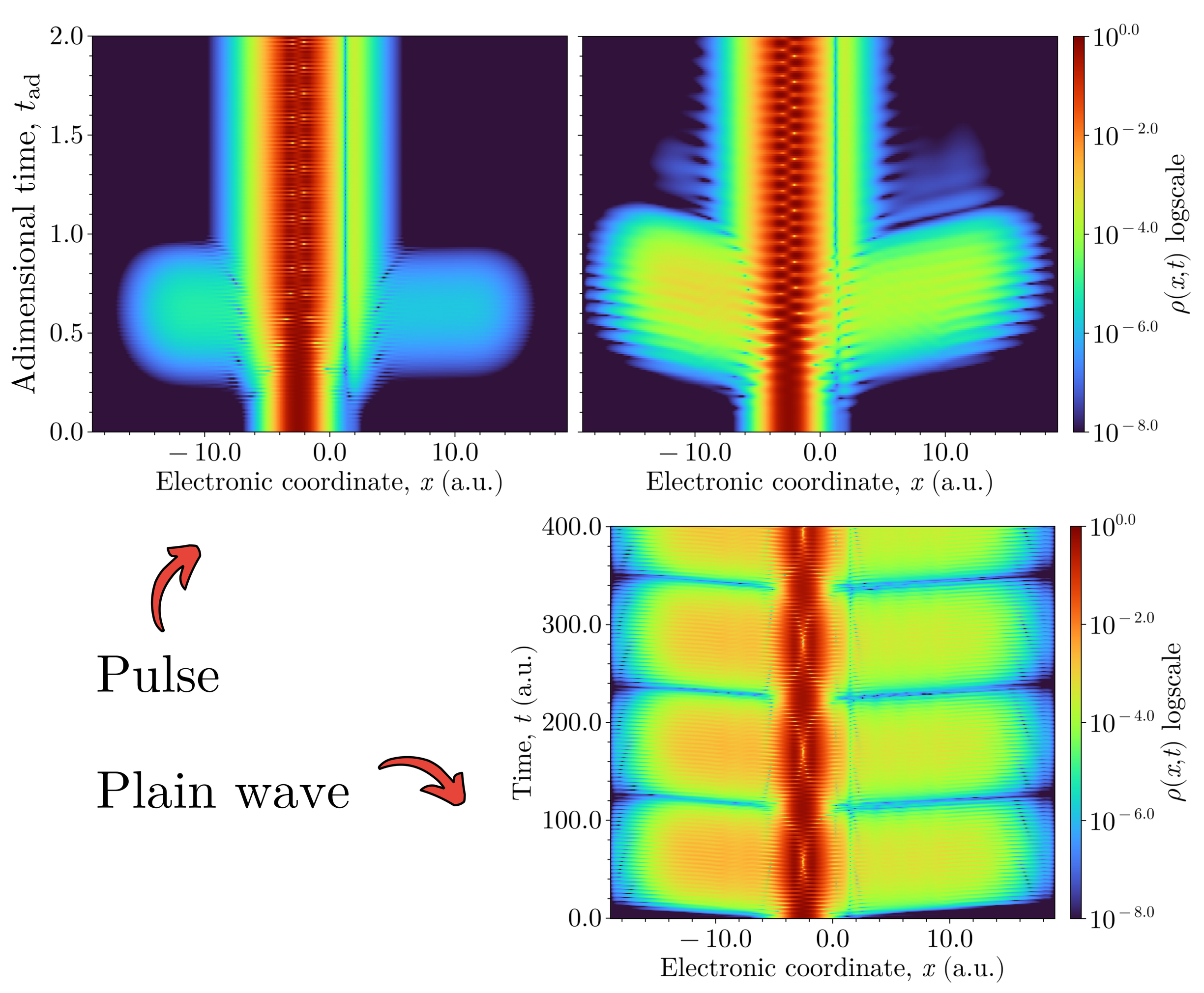
Dinámica de un electrón

$$\begin{aligned}
\hat{H}_{e_i} &= \hat{T}_{1e}(x) + \hat{V}(x)\\
\hat{V}(x) &= -V_0\big[\Theta(x - x_I)\Theta(x_{II} - x)\\
&+ \Theta(x - x_{III})\Theta(x_{IV} - x)\big]\\
x_I &= -(w_r + d/2)\\
x_{III} &= -x_{II} = d/2\\
x_{IV} &= w_l + d/2
\end{aligned}$$

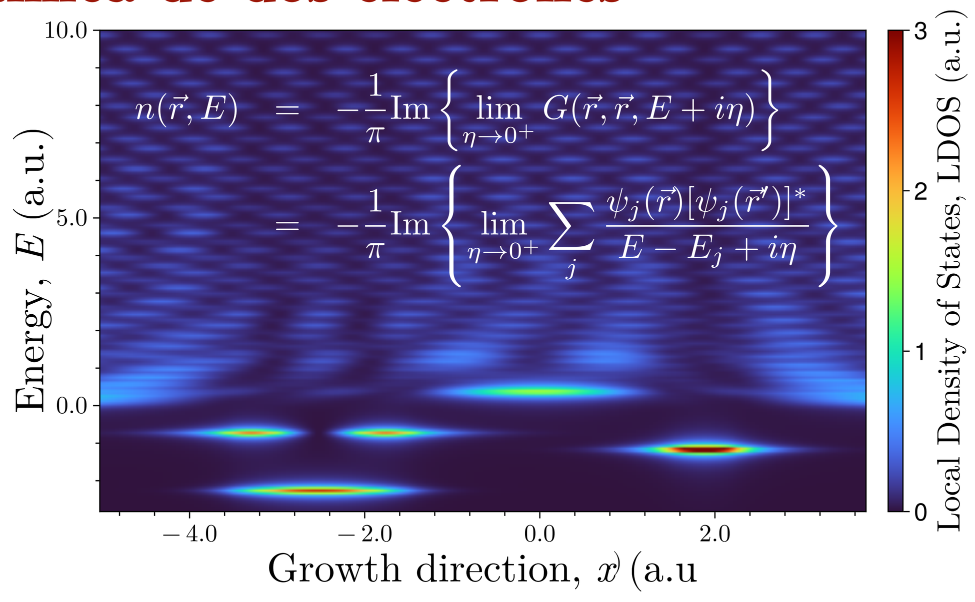
MCTDH · CCAD · International Year of Quantum Science and Technology · FEMTISE · julia

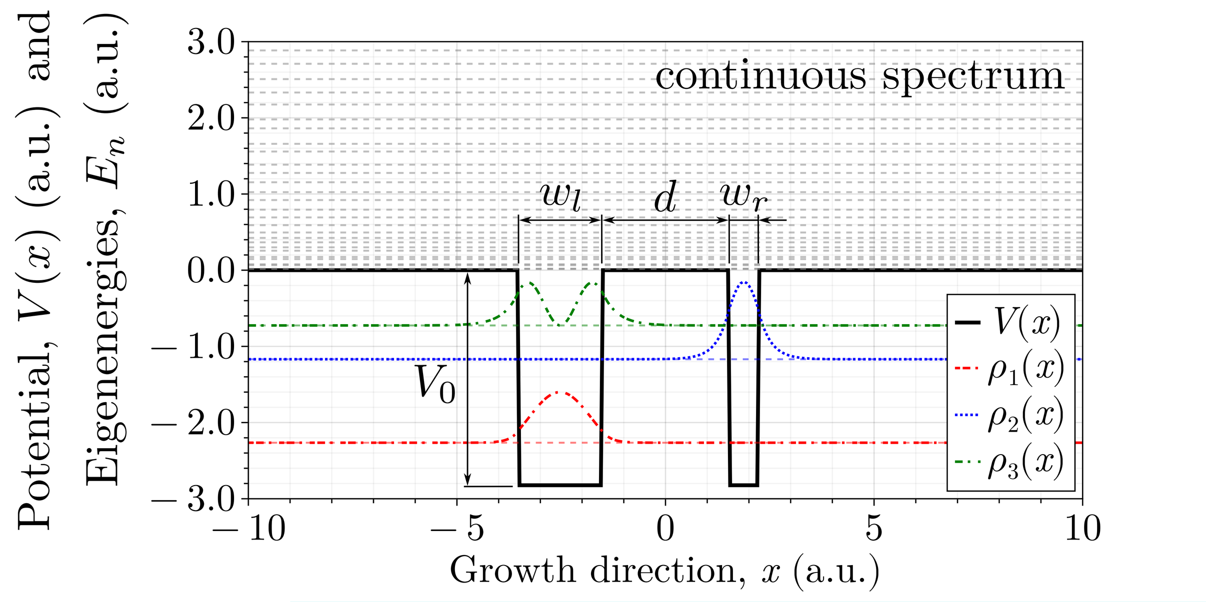
Densidad de probabilidad

$$\rho(x_i, t) = \int|\psi(x_1, x_2, t)|^2 dx_j$$



Dinámica de dos electrones





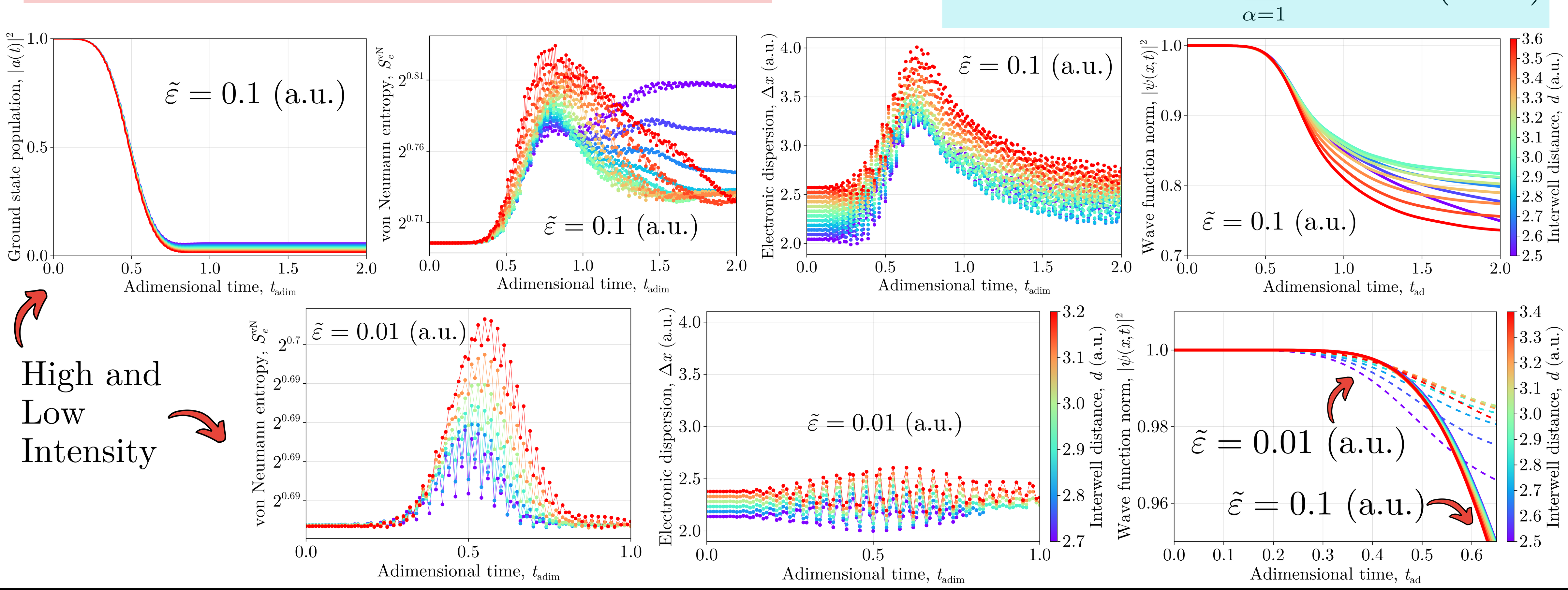
$$\begin{aligned}
\hat{H}_{2e} &= \sum_{i=\{1,2\}}\left(\hat{H}_{e_i} + \hat{H}^{(e_i)}_{\text{CAPs}} + \hat{H}^{(e_i)}_{\text{laser}}\right) + \hat{V}_{e12}\\
\hat{H}^{(e_i)}_{\text{CAPs}} &= \hat{H}^{(e_i)}_{\text{CAP},R} + \hat{H}^{(e_i)}_{\text{CAP},L}\\
\hat{V}_{e12}(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{|x_1 - x_2|^2 + a^2}}
\end{aligned}$$

von Neumann entropy (electronic entanglement)

$$\begin{aligned}
\hat{\rho}_{e_i}(t) &= \text{Tr}_{e_j}(\hat{\rho}(t))\\
\hat{\rho}_{e_i}(t)|\lambda_\alpha^{(e_i)}(t)\rangle &= \lambda_\alpha^{(e_i)}(t)|\lambda_\alpha^{(e_i)}(t)\rangle
\end{aligned}$$

$$S_e^{\text{vN}}(t) = -\sum_{\alpha=1}^{N}\lambda_\alpha^{(e)}(t)\log_2\left(\lambda_\alpha^{(e)}(t)\right)$$

High and Low Intensity



Conclusiones

En este trabajo se verificó que la aproximación de sistema de dos niveles y de onda rotante, que determina la relación frecuencia-intensidad del pulso, es válida para un electrón en un PQDs. La dinámica electrónica, cuantificada mediante entropía de entrelazamiento, muestra un pico sincronizado con la emisión de densidad durante la transición láser, correlacionándose con la dispersión solo a altas intensidades. Un hallazgo crítico es el comportamiento de la pérdida de la norma de la función de onda; para baja intensidad, es máxima a distancias cortas entre pozos, mientras que para alta intensidad, lo es a distancias largas. Esto revela que la interacción electrón-campo, y por ende la estabilidad y eficiencia de los procesos, dependen de manera significativa de ambos parámetros.

Referencias

[1] A. Bande, Electron dynamics of interatomic Coulombic decay in quantum dots induced by a laser field, J. Chem. Phys. 138, 214309 (2013).
[2] F. M. Pont, A. Bande, and L. S. Cederbaum, Electron-Correlation Driven Capture and Release in Double Quantum Dots, J. Phys.: Condens. Matter 28, 075301 (2016).
[3] T. Goldzak, L. Gantz, I. Gilary, G. Bahir, and N. Moiseyev, Interatomic Coulombic Decay in Two Coupled Quantum Wells, Phys. Rev. B 91, 041303 (2015).
[4] Mendez, M., & Pont, F. M. (2025). Dynamics of correlations and entanglement generation in electron-molecule inelastic scattering. Physical Review A, 111(5), 052411.
[5] Meyer, H. D., Manthe, U., & Cederbaum, L. S. (1990). The multi-configurational time-dependent Hartree approach. Chemical Physics Letters, 165(1), 73-78.
[6] J. F. Duarte, Caracterización del decaimiento interatómico por interacción coulombiana en pozos cuánticos semiconductores, Master Thesis, http://hdl.handle.net 11086/550262.
[7] D. Tannor, Introduction to Quantum Mechanics: A Time-Dependent Perspective (MIT Press, 2008).