



## Centro de Investigaciones en Óptica, A.C.

*Taller teórico-práctico: Nanotecnología y óptica de altas intensidades  
Óptica no lineal en sistemas confinados*

Norberto Arzate Plata  
[narzate@cio.mx](mailto:narzate@cio.mx)

<http://aida.cio.mx/~narzate/pwp/Site/Welcome.html>

24-28 de Agosto del 2015

# *Contenido*

*Sistemas confinados*

*Susceptibilidades lineal y no lineal*

## *Objetivos*

- Dar a conocer sistemas confinados de pozo de potencial.
- Dar a conocer el formalismo de para el cálculo de las susceptibilidades lineal y no lineal en la representación de interacción.
- Dar a conocer los pasos a seguir para el calculo de las susceptibilidades lineal y no lineal para un pozo de potencial.

# *Semiconductores*

**Un material semiconductor es un cristal que puede comportarse bajo ciertas condiciones como conductor o aislante, dependiendo de la intensidad de los campos eléctricos o magnéticos externos o de la temperatura.**

**Elementos semiconductores:** Si, Ge, B, As, Sb, Te, etc.

**Compuestos binarios semiconductores:** GaAs, InSb, AlP, etc.

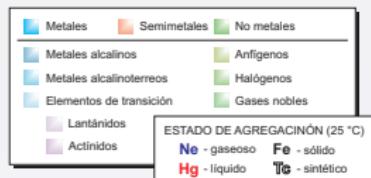
**Compuestos ternarios semiconductores:** AlGaAs, InGaAs, etc.

# TABLA PERIÓDICA DE LOS ELEMENTOS

<http://www.periodni.com/es/>

PERÍODO	GRUPO	
1	IA	HIDRÓGENO
2	IIA	LITIO
3	III A	MAGNESIO
4	IV A	CALCIO
5	V A	ESTRÓNICO
6	VI A	CESIO
7	VIIA	FRANCILO

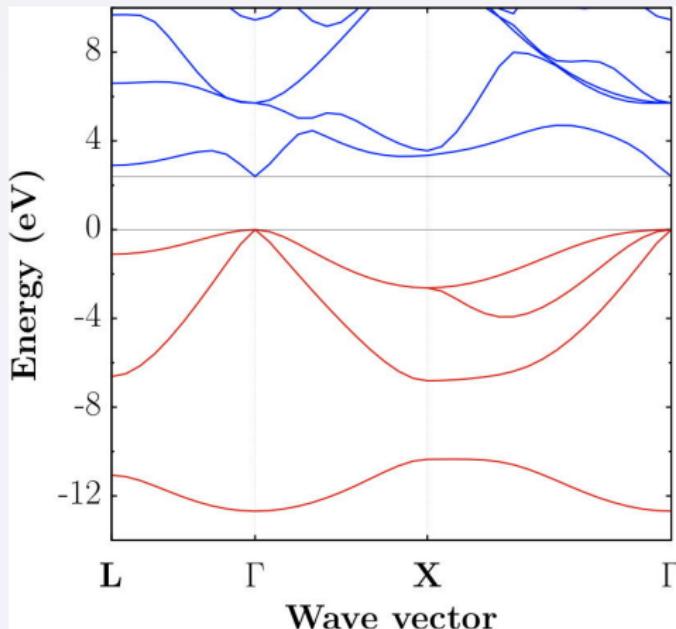
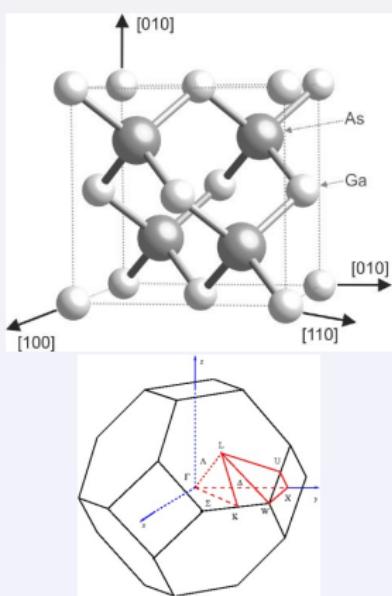
MASA ATÓMICA RELATIVA (1)  
 GRUPO IUPAC      13      GRUPO CAS  
 NÚMERO ATÓMICO      5      10.811  
 SÍMBOLO      B      BORO  
 NOMBRE DEL ELEMENTO



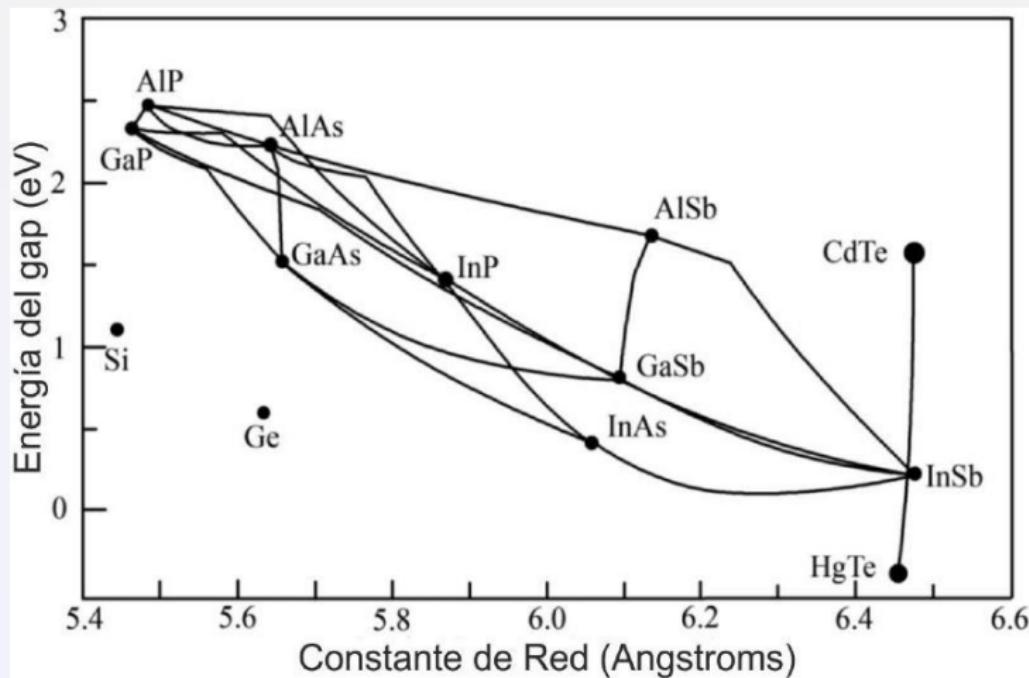
1	IA	H	2	IIA	Be	3	III A	B	4	IV A	Si	5	V A	P	6	VI A	S	7	VIIA	Cl	8	VIIIA	Ar																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
1	1.0079		2	9.0122		3	6.941		4	24.305		5	10.811		6	22.990		7	40.026		8	18.998																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																		
2	Li	LITIO	3	Be	BERILIO	4	Na	MAGNESIO	5	Vb		6	Vib		7	VIIb		8	VIIIB		9	Al	ALUMINIO																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																	
3	11	22.990	4	12	9.0122	5	19	39.098	6	20	40.078	7	21	44.956	8	22	47.867	9	23	50.942	10	24	51.996	11	25	54.938	12	26	55.845	13	27	58.933	14	28	58.693	15	29	63.546	16	30	65.38	17	31	68.723	18	32	72.64	19	33	74.922	20	34	78.96	21	35	79.904	22	36	83.798	23	37	85.468	24	38	87.62	25	39	88.906	26	40	91.224	27	41	92.906	28	42	95.96	29	43	(98)	30	44	101.07	31	45	102.91	32	46	106.42	33	47	107.87	34	48	112.41	35	49	114.82	36	50	118.71	37	51	121.76	38	52	127.60	39	53	126.90	40	54	131.29	41	55	132.91	42	56	137.33	43	57	-71	44	57.71	45	72	178.49	46	73	180.95	47	74	183.84	48	75	186.21	49	76	190.23	50	77	192.22	51	78	195.08	52	79	196.97	53	80	200.59	54	81	204.38	55	82	207.2	56	83	208.98	57	84	(209)	58	85	(210)	59	86	(222)	60	87	(223)	61	88	(226)	62	89	-103	63	Ac-Lr	Actínidos	64	Fr	Ra	65	Db	Rutherfordio	66	Sp	Dubnio	67	Es	Seaborgio	68	Nh	Bohrio	69	Ts	Hassio	70	Mt	Meitnerio	71	Ds	Darmstadtio	72	Rs	Roentgenio	73	Nh	Copernicio	74	Uut	Ununtrio	75	Fl	Flerovio	76	Uup	Ununpentio	77	Lv	Livermorio	78	Uus	Ununseptio	79	Uuo	Ununoctio	80	Fr	Francio	81	Pa	Protactnio	82	U	Urano	83	Np	Neptunio	84	Pu	Plutonio	85	Am	Americio	86	Cm	Curio	87	Bk	Berkelio	88	Cf	Californio	89	Dy	Disprosio	90	Ho	Holmio	91	Er	Erbio	92	Tm	Tulio	93	Yb	Yterbio	94	Lu	Lutecio	95	Th	Torio	96	Pa	Protactnio	97	U	Urano	98	Np	Neptunio	99	Pu	Plutonio	100	Am	Americio	101	Cm	Curio	102	Bk	Berkelio	103	Cf	Californio	104	Dy	Disprosio	105	Ho	Holmio	106	Er	Erbio	107	Tm	Tulio	108	Yb	Yterbio	109	Lu	Lutecio	110	Th	Torio	111	Pa	Protactnio	112	U	Urano	113	Np	Neptunio	114	Pu	Plutonio	115	Am	Americio	116	Cm	Curio	117	Bk	Berkelio	118	Cf	Californio	119	Dy	Disprosio	120	Ho	Holmio	121	Er	Erbio	122	Tm	Tulio	123	Yb	Yterbio	124	Lu	Lutecio	125	Th	Torio	126	Pa	Protactnio	127	U	Urano	128	Np	Neptunio	129	Pu	Plutonio	130	Am	Americio	131	Cm	Curio	132	Bk	Berkelio	133	Cf	Californio	134	Dy	Disprosio	135	Ho	Holmio	136	Er	Erbio	137	Tm	Tulio	138	Yb	Yterbio	139	Lu	Lutecio	140	Th	Torio	141	Pa	Protactnio	142	U	Urano	143	Np	Neptunio	144	Pu	Plutonio	145	Am	Americio	146	Cm	Curio	147	Bk	Berkelio	148	Cf	Californio	149	Dy	Disprosio	150	Ho	Holmio	151	Er	Erbio	152	Tm	Tulio	153	Yb	Yterbio	154	Lu	Lutecio	155	Th	Torio	156	Pa	Protactnio	157	U	Urano	158	Np	Neptunio	159	Pu	Plutonio	160	Am	Americio	161	Cm	Curio	162	Bk	Berkelio	163	Cf	Californio	164	Dy	Disprosio	165	Ho	Holmio	166	Er	Erbio	167	Tm	Tulio	168	Yb	Yterbio	169	Lu	Lutecio	170	Th	Torio	171	Pa	Protactnio	172	U	Urano	173	Np	Neptunio	174	Pu	Plutonio	175	Am	Americio	176	Cm	Curio	177	Bk	Berkelio	178	Cf	Californio	179	Dy	Disprosio	180	Ho	Holmio	181	Er	Erbio	182	Tm	Tulio	183	Yb	Yterbio	184	Lu	Lutecio	185	Th	Torio	186	Pa	Protactnio	187	U	Urano	188	Np	Neptunio	189	Pu	Plutonio	190	Am	Americio	191	Cm	Curio	192	Bk	Berkelio	193	Cf	Californio	194	Dy	Disprosio	195	Ho	Holmio	196	Er	Erbio	197	Tm	Tulio	198	Yb	Yterbio	199	Lu	Lutecio	200	Th	Torio	201	Pa	Protactnio	202	U	Urano	203	Np	Neptunio	204	Pu	Plutonio	205	Am	Americio	206	Cm	Curio	207	Bk	Berkelio	208	Cf	Californio	209	Dy	Disprosio	210	Ho	Holmio	211	Er	Erbio	212	Tm	Tulio	213	Yb	Yterbio	214	Lu	Lutecio	215	Th	Torio	216	Pa	Protactnio	217	U	Urano	218	Np	Neptunio	219	Pu	Plutonio	220	Am	Americio	221	Cm	Curio	222	Bk	Berkelio	223	Cf	Californio	224	Dy	Disprosio	225	Ho	Holmio	226	Er	Erbio	227	Tm	Tulio	228	Yb	Yterbio	229	Lu	Lutecio	230	Th	Torio	231	Pa	Protactnio	232	U	Urano	233	Np	Neptunio	234	Pu	Plutonio	235	Am	Americio	236	Cm	Curio	237	Bk	Berkelio	238	Cf	Californio	239	Dy	Disprosio	240	Ho	Holmio	241	Er	Erbio	242	Tm	Tulio	243	Yb	Yterbio	244	Lu	Lutecio	245	Th	Torio	246	Pa	Protactnio	247	U	Urano	248	Np	Neptunio	249	Pu	Plutonio	250	Am	Americio	251	Cm	Curio	252	Bk	Berkelio	253	Cf	Californio	254	Dy	Disprosio	255	Ho	Holmio	256	Er	Erbio	257	Tm	Tulio	258	Yb	Yterbio	259	Lu	Lutecio	260	Th	Torio	261	Pa	Protactnio	262	U	Urano	263	Np	Neptunio	264	Pu	Plutonio	265	Am	Americio	266	Cm	Curio	267	Bk	Berkelio	268	Cf	Californio	269	Dy	Disprosio	270	Ho	Holmio	271	Er	Erbio	272	Tm	Tulio	273	Yb	Yterbio	274	Lu	Lutecio	275	Th	Torio	276	Pa	Protactnio	277	U	Urano	278	Np	Neptunio	279	Pu	Plutonio	280	Am	Americio	281	Cm	Curio	282	Bk	Berkelio	283	Cf	Californio	284	Dy	Disprosio	285	Ho	Holmio	286	Er	Erbio	287	Tm	Tulio	288	Yb	Yterbio	289	Lu	Lutecio	290	Th	Torio	291	Pa	Protactnio	292	U	Urano	293	Np	Neptunio	294	Pu	Plutonio	295	Am	Americio	296	Cm	Curio	297	Bk	Berkelio	298	Cf	Californio	299	Dy	Disprosio	300	Ho	Holmio	301	Er	Erbio	302	Tm	Tulio	303	Yb	Yterbio	304	Lu	Lutecio	305	Th	Torio	306	Pa	Protactnio	307	U	Urano	308	Np	Neptunio	309	Pu	Plutonio	310	Am	Americio	311	Cm	Curio	312	Bk	Berkelio	313	Cf	Californio	314	Dy	Disprosio	315	Ho	Holmio	316	Er	Erbio	317	Tm	Tulio	318	Yb	Yterbio	319	Lu	Lutecio	320	Th	Torio	321	Pa	Protactnio	322	U	Urano	323	Np	Neptunio	324	Pu	Plutonio	325	Am	Americio	326	Cm	Curio	327	Bk	Berkelio	328	Cf	Californio	329	Dy	Disprosio	330	Ho	Holmio	331	Er	Erbio	332	Tm	Tulio	333	Yb	Yterbio	334	Lu	Lutecio	335	Th	Torio	336	Pa	Protactnio	337	U	Urano	338	Np	Neptunio	339	Pu	Plutonio	340	Am	Americio	341	Cm	Curio	342	Bk	Berkelio	343	Cf	Californio	344	Dy	Disprosio	345	Ho	Holmio	346	Er	Erbio	347	Tm	Tulio	348	Yb	Yterbio	349	Lu	Lutecio	350	Th	Torio	351	Pa	Protactnio	352	U	Urano	353	Np	Neptunio	354	Pu	Plutonio	355	Am	Americio	356	Cm	Curio	357	Bk	Berkelio	358	Cf	Californio	359	Dy	Disprosio	360	Ho	Holmio	361	Er	Erbio	362	Tm	Tulio	363	Yb	Yterbio	364	Lu	Lutecio	365	Th	Torio	366	Pa	Protactnio	367	U	Urano	368	Np	Neptunio	369	Pu	Plutonio	370	Am	Americio	371	Cm	Curio	372	Bk	Berkelio	373	Cf	Californio	374	Dy	Disprosio	375	Ho	Holmio	376	Er	Erbio	377	Tm	Tulio	378	Yb	Yterbio	379	Lu	Lutecio	380	Th	Torio	381	Pa	Protactnio	382	U	Urano	383	Np	Neptunio	384	Pu	Plutonio	385	Am	Americio	386	Cm	Curio	387	Bk	Berkelio	388	Cf	Californio	389	Dy	Disprosio	390	Ho	Holmio	391	Er	Erbio	392	Tm	Tulio	393	Yb	Yterbio	394	Lu	Lutecio	395	Th	Torio	396	Pa	Protactnio	397	U	Urano	398	Np	Neptunio	399	Pu	Plutonio	400	Am	Americio	401	Cm	Curio	402	Bk	Berkelio	403	Cf	Californio	404	Dy	Disprosio	405	Ho	Holmio	406	Er	Erbio	407	Tm	Tulio	408	Yb	Yterbio	409	Lu	Lutecio	410	Th	Torio	411	Pa	Protactnio	412	U	Urano	413	Np	Neptunio	414	Pu	Plutonio	415	Am	Americio	416	Cm	Curio	417	Bk	Berkelio	418	Cf	Californio	419	Dy	Disprosio	420	Ho	Holmio	421	Er	Erbio	422	Tm	Tulio	423	Yb	Yterbio	424	Lu	Lutecio	425	Th	Torio	426	Pa	Protactnio	427	U	Urano	428	Np	Neptunio	429	Pu	Plutonio	430	Am	Americio	431	Cm	Curio	432	Bk	Berkelio	433	Cf	Californio	434	Dy	Disprosio	435	Ho	Holmio	436	Er	Erbio	437	Tm	Tulio	438	Yb	Yterbio	439	Lu	Lutecio	440	Th	Torio	441	Pa	Protactnio	442	U	Urano	443	Np	Neptunio	444	Pu	Plutonio	445	Am	Americio	446	Cm	Curio	447	Bk	Berkelio	448	Cf	Californio	449	Dy	Disprosio	450	Ho	Holmio	451	Er	Erbio	452	Tm	Tulio	453	Yb	Yterbio	454	Lu	Lutecio	455	Th	Torio	456	Pa	Protactnio	457	U	Urano	458	Np	Neptunio	459	Pu	Plutonio	460	Am	Americio	461	Cm	Curio	462	Bk	Berkelio	463	Cf	Californio	464	Dy	Disprosio	465	Ho	Holmio	466	Er	Erbio	467	Tm	Tulio	468	Yb	Yterbio	469	Lu	Lutecio	470	Th	Torio	471	Pa	Protactnio	472	U	Urano	473	Np	Neptunio	474	Pu	Plutonio	475	Am	Americio	476	Cm	Curio	477	Bk	Berkelio	478	Cf	Californio	479	Dy	Disprosio	480	Ho	Holmio	481	Er	Erbio	482	Tm	Tulio	483	Yb	Yterbio	484	Lu	Lutecio	485	Th	Torio	486</

# Estructura de bandas de GaAs

Constante de red:  $a_0 = 5.65 \text{ \AA}$

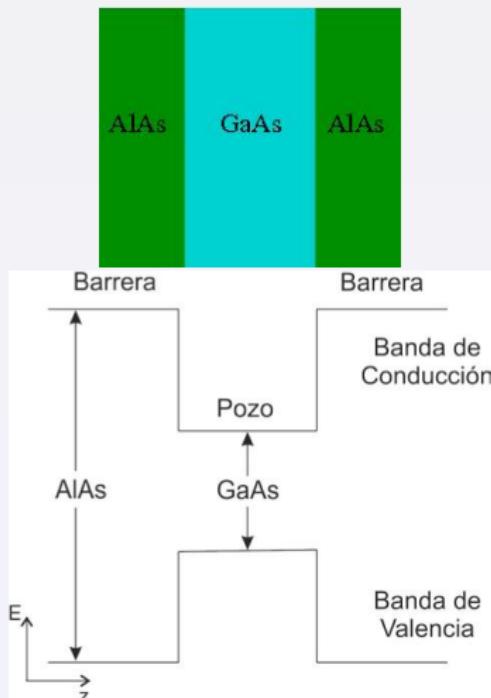


## Brecha de energía Vs constante de red



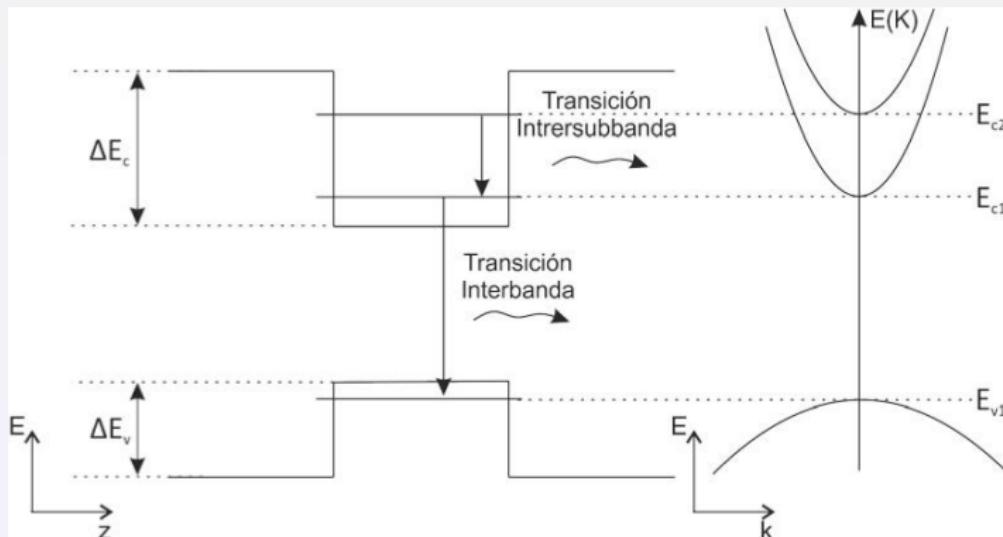
Referencia: J.V. González Fernández, Espectroscopias ópticas y su aplicación para el estudio de nanoestructuras, Tesis de Doctorado, 2015.

# Pozo de potencial



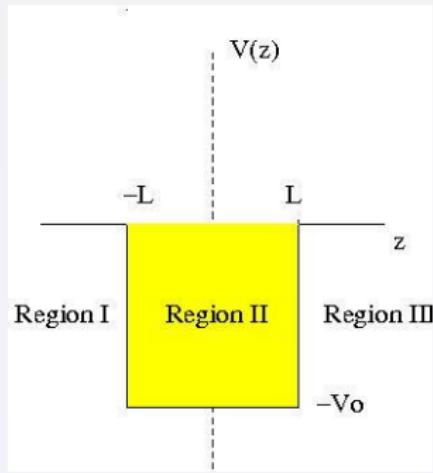
**Referencia:** J.V. González Fernández, Espectroscopias ópticas y su aplicación para el estudio de nanoestructuras, Tesis de Doctorado, 2015.

# Transiciones



**Referencia:** J.V. González Fernández, Espectroscopias ópticas y su aplicación para el estudio de nanoestructuras, Tesis de Doctorado, 2015.

# Pozo de potencial finito



## Potencial de un pozo finito

$$V = \begin{cases} -V_0 & -L < x < L \\ 0 & x < -L; x > L \end{cases} \quad (1)$$

## Funciones de onda

$$\Psi_{II}(z) = A_1 e^{k_1 z}, \quad (2)$$

$$\Psi_{II}(z) = A_2 \cos(k_1 z) + B_2 \sin(k_1 z), \quad (3)$$

$$\Psi_{II}(z) = B_3 e^{-k_1 z} \quad (4)$$

**Soluciones simétrica y antisimétrica, respectivamente:**

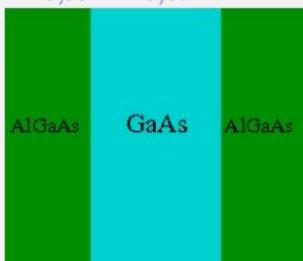
$$(k_2 L)^2 + (k_1 L)^2 = r^2 \quad k_1 L = k_2 L \tan(k_2 L), \quad (5)$$

$$(k_2 L)^2 + (k_1 L)^2 = r^2 \quad k_1 L = -k_2 L \cot(k_2 L), \quad (6)$$

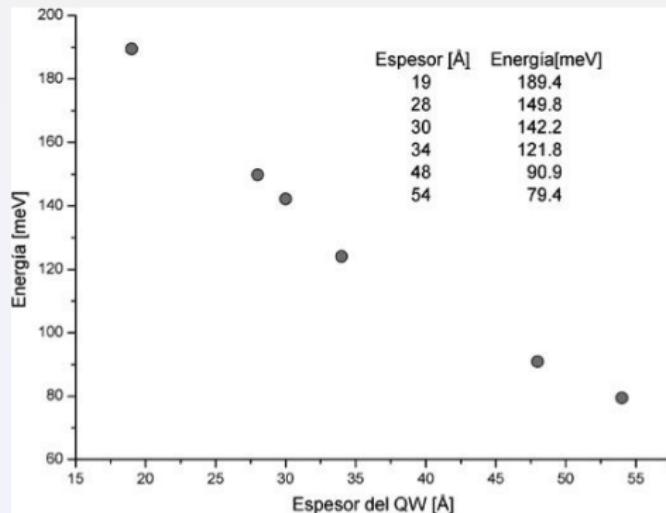
**con**  $r^2 = \frac{2mV_0L^2}{\hbar^2}$ .

# Pozo de potencial finito

**Al<sub>0,33</sub> Ga<sub>0,67</sub> As**

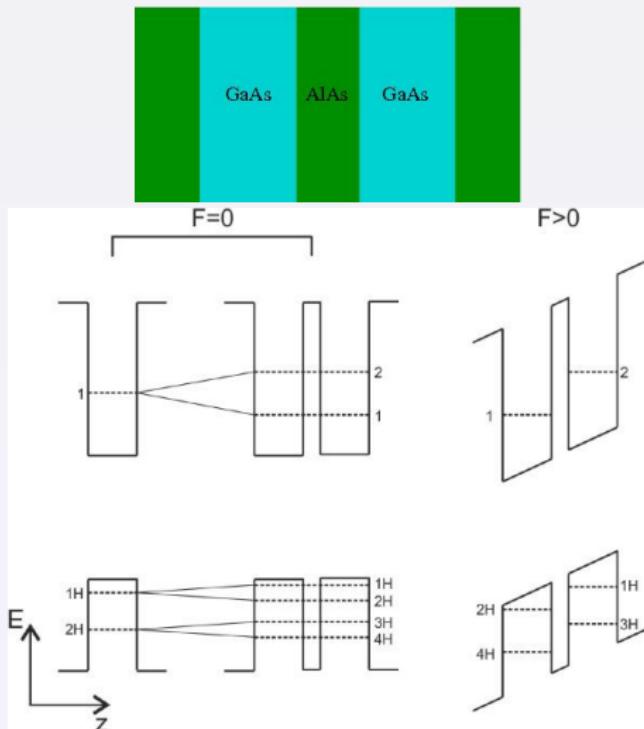


$V_0 = 255 \text{ meV};$   
 $2L = 54 \text{ \AA};$   
 $m_{\text{eff}}^{\text{barrera}} = 0.09 m_e;$   
 $m_{\text{eff}}^{\text{pozo}} = 0.63 m_e;$   
 $N_e = 1 \times 10^{19} \text{ cm}^{-3}$   
 $E_1 = 79 \text{ meV};$   
 $E_2 = 249 \text{ meV};$



**Referencia:** J.V. González Fernández, Espectroscopias ópticas y su aplicación para el estudio de nanoestructuras, Tesis de Doctorado, 2015.

## Doble pozo de potencial



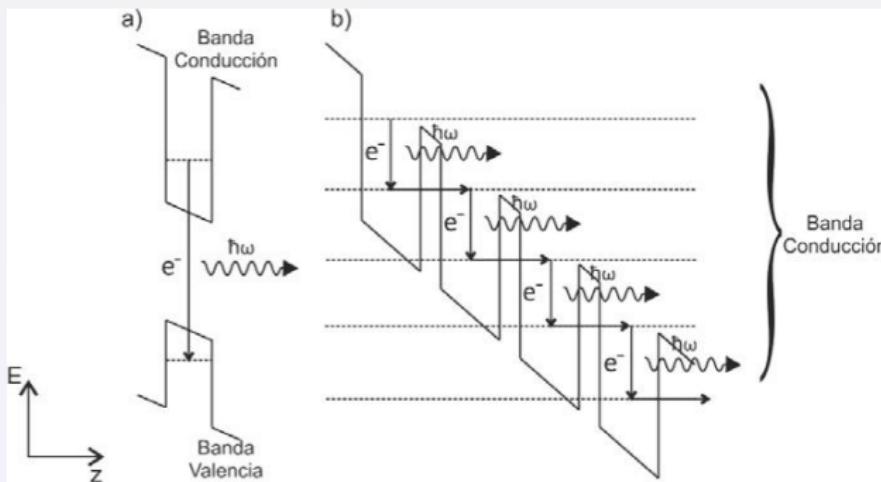
**Referencia:** J.V. González Fernández, Espectroscopias ópticas y su aplicación para el estudio de nanoestructuras, Tesis de Doctorado, 2015.

## *Pozos dobles*

### *Aplicaciones*

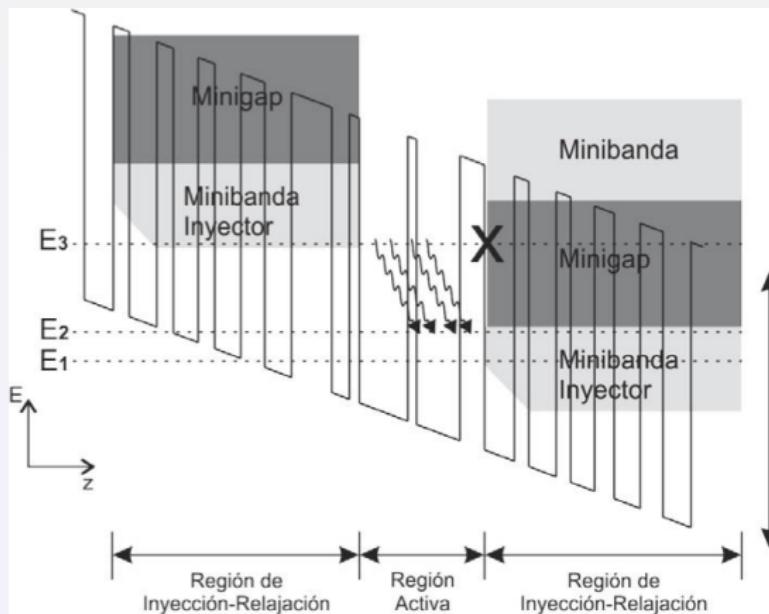
- **Dispositivos de emisión y absorción (IR,THz).**
- **Dispositivos láseres, láseres de cascada cuántica (THz).**
- **Detectores.**
- **Transistores.**
- **Sensores.**

# Láser de cascada cuántica



**Referencia:** J.V. González Fernández, Espectroscopias ópticas y su aplicación para el estudio de nanoestructuras, Tesis de Doctorado, 2015.

## Láser de cascada cuántica



**Referencia:** J.V. González Fernández, **Espectroscopias ópticas y su aplicación para el estudio de nanoestructuras, Tesis de Doctorado, 2015.**

# Polarización

**La polarización es el sistema CGS esta dado por**

$$\begin{aligned}\tilde{\mathbf{P}}(t) &= \alpha^{(1)}\tilde{\mathbf{E}}(t) + \chi^{(2)}\tilde{\mathbf{E}}(t)\tilde{\mathbf{E}}(t) + \Gamma^{(2)}\tilde{\mathbf{E}}(t)\nabla\tilde{\mathbf{E}}(t) + \chi^{(3)}\tilde{\mathbf{E}}(t)\tilde{\mathbf{E}}(t)\tilde{\mathbf{E}}(t) + \dots \\ &= \tilde{\mathbf{P}}^{(1)}(t) + \tilde{\mathbf{P}}^{(2)}(t) + \tilde{\mathbf{P}}^{(3)}(t) + \dots\end{aligned}\quad (7)$$

**La polarizacion en el sistema MKS, se obtiene multiplicando la ecuación (7) por  $\epsilon_0$ .**

$$\tilde{P}_i(t) = \alpha_{ij}^{(1)}\tilde{E}_j(t) + \chi_{ijk}^{(2)}\tilde{E}_j(t)\tilde{E}_k(t) + \Gamma_{ijkl}^{(2)}\tilde{E}_j(t)\nabla_k\tilde{E}_l(t) + \chi_{ijkl}^{(3)}\tilde{E}_j(t)\tilde{E}_k(t)\tilde{E}_l(t) + \dots\quad (8)$$

$\alpha^{(1)}$

$\chi^{(2)}, \Gamma^{(2)}$

$\chi^{(3)}$

**Susceptibilidad lineal (emisión y absorción)**

**Generación de segundo armónico**

**suma y resta de frecuencias,...**

**Tercer armónico.**

## *Estimaciones*

$$\alpha^{(1)} \sim 1$$

$$\chi^{(2)} \sim 1/E_{at} \approx 1,94 \times 10^{-12} \text{ m/V} \approx 6 \times 10^{-8} \text{ cm/statvolt}$$

$$\Gamma^{(2)} \sim a_0/E_{at} \approx 10^{-22} \text{ m}^2/\text{V} \approx 3 \times 10^{-18} \text{ cm}^2/\text{statvolt}$$

$$\chi^{(3)} \sim \alpha^{(1)}/E_{at}^2 \approx 3,78 \times 10^{-24} \text{ m}^2/\text{V}$$

$$E_{at} = 5,14 \times 10^{11} \text{ V/m}$$

$$a_0 = \mathbf{0.529 \text{ \AA}}$$

# *CGS - MKS*

## *CGS*

$$[\tilde{P}] = [\tilde{E}] = \text{statvolt/cm}$$

$\chi^{(1)}$  es adimensional

$$[\chi^{(2)}] = [1/\tilde{E}] = \text{cm/statvolt}$$

$$[\Gamma^{(2)}] = [a_0/\tilde{E}] = \text{cm}^2/\text{statvolt}$$

$$[\chi^{(3)}] = [1/\tilde{E}^2] = \text{cm}^2/\text{statvolt}^2$$

## *MKS*

$$[\tilde{P}] = \text{C/m}^2$$

$$[\tilde{E}] = \text{V/m}$$

$\chi^{(1)}$  es adimensional

$$[\chi^{(2)}] = [1/\tilde{E}] = \text{m/V}$$

$$[\Gamma^{(2)}] = [a_0/\tilde{E}] = \text{m}^2/\text{V}$$

$$[\chi^{(3)}] = [1/\tilde{E}^2] = \text{m}^2/\text{V}^2$$

## *Conversion*

$$\tilde{E} \text{ (MKS)} = 3 \times 10^4 \tilde{E} \text{ (CGS)}$$

$$\chi^{(1)} \text{ (MKS)} = 4\pi \chi^{(1)} \text{ (CGS)}$$

$$\chi^{(2)} \text{ (MKS)} = 4.189 \times 10^{-4} \chi^{(2)} \text{ (CGS)}$$

$$\Gamma^{(2)} \text{ (MKS)} = 4.189 \times 10^{-6} \Gamma^{(2)} \text{ (CGS)}$$

$$\chi^{(3)} \text{ (MKS)} = 1.40 \times 10^{-8} \chi^{(3)} \text{ (CGS)}$$

## *Problema mecánico cuántico*

**El hamiltoniano total de un sistema mecánico cuántico puede escribirse como**

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}', \quad (9)$$

**donde el hamiltoniano no perturbado,  $\hat{H}_0$ , satisface la ecuación de Schrödinger**

$$i\hbar \frac{d\Psi(t)}{dt} = \hat{H}_0 \Psi(t). \quad (10)$$

**$\hat{H}'$  es el hamiltoniano de perturbación.**

## *Representación de interacción*

**Las correcciones a primer orden y segundo en el valor de expectación de una cantidad física  $\hat{O}$  debido a la perturbación  $\hat{H}'$  son respectivamente:**

$$\delta\hat{O}^{(1)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \text{tr} \left\{ \rho_0 \int_{-\infty}^t dt_1 [\hat{O}(t), \hat{H}'(t_1)] \right\} \quad (11)$$

$$\delta\hat{O}^{(2)}(t) = \frac{1}{(i\hbar)^2} \text{tr} \left\{ \rho_0 \int_{-\infty}^t dt_1 \int_{-\infty}^{t_1} dt_2 [[\hat{O}(t), \hat{H}'(-t_1)], \hat{H}'(-t_2)] \right\}, \quad (12)$$

(13)

donde  $\rho_0$  es la matriz de densidad no perturbada.

**Para el momento dipolar eléctrico tenemos**

$$\hat{p}_i = e\hat{x}_i, \quad (14)$$

**y el momento cuadrupolar eléctrico**

$$\hat{Q}_{ij} = e\hat{x}_i\hat{x}_j, \quad (15)$$

**donde, el operador de posición dependiente del tiempo se escribe**

$$\hat{x}(t) = e^{(i\hat{H}_0 t)} x e^{(-i\hat{H}_0 t)}. \quad (16)$$

**Las perturbaciones a primer y segundo orden son respectivamente:**

$$\hat{H}' = e\hat{x}_j E_j \quad (17)$$

$$\hat{H}' = e\hat{x}_j E_j + \frac{1}{2} e\hat{x}_j\hat{x}_k\nabla_j E_k \quad (18)$$

$$(19)$$

**donde se asume la convección de suma de Einstein sobre índices repetidos.**

**Las correcciones a primer orden a la susceptibilidad se obtiene sustituyendo las ecuaciones (17) en (11)**

$$\alpha_{ij} = \frac{Ne^2}{(i\hbar)} \text{tr} \left\{ \rho_0 \int_{-\infty}^0 dt [\hat{x}_i(t), \hat{x}_j] e^{i\omega t} \right\} \quad (20)$$

**Desarrollando el conmutador de la ecuación (20), encorchetandolo entre los estados  $\langle n |$  y  $| m \rangle$  y teniendo en cuenta las relaciones**

$$\langle n | e^{(i\hat{H}_0 t / \hbar)} = e^{i\hat{E}_n t / \hbar}, \quad (21)$$

$$e^{(i\hat{H}_0 t / \hbar)} | n \rangle = e^{-i\hat{E}_n t / \hbar}, \quad (22)$$

$$| p \rangle \langle p | = 1. \quad (23)$$

## Obtenemos

$$\begin{aligned}
 \alpha_{ij} &= \frac{-Ne^2}{i\hbar} \text{tr} \left\{ \rho_0 \sum_{np} \left[ \langle \hat{x}_i \rangle_{np} \langle \hat{x}_j \rangle_{pn} \int_{-\infty}^0 e^{i(\omega + \omega_{np})t} dt \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. - \langle \hat{x}_j \rangle_{np} \langle \hat{x}_i \rangle_{pn} \int_{-\infty}^0 e^{i(\omega + \omega_{pn})t} dt \right] \right\} \tag{24}
 \end{aligned}$$

$$\alpha_{ij}(\omega) = \alpha_0 \tilde{\alpha}_{ij}(\tilde{\omega}), \quad (25)$$

**donde**

$$\tilde{\alpha}_{ij}(\tilde{\omega}) = \sum_{np} \left( \frac{<\hat{x}_i>_{np} <\hat{x}_j>_{pn}}{\tilde{\omega}_{np} + \tilde{\omega}} + \frac{<\hat{x}_j>_{np} <\hat{x}_i>_{pn}}{\tilde{\omega}_{np} - \tilde{\omega}} \right) \quad (26)$$

**con**

$$\alpha_0 = \frac{Ne^2 L^2}{\hbar \omega'}. \quad (27)$$

***N es la densidad de estados, e es la carga del electrón, L es una longitud de normalización del orden de la longitud de onda de De Broglie.***

**Los valores de expectación de la posición se calculan a través de la expresión.**

$$\langle \hat{x}_i \rangle_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(\mathbf{r})^* \hat{x}_i \Psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (28)$$

y

$$\begin{aligned}\tilde{\omega} &= \omega/\omega, \\ \omega_{np} &= \tilde{\omega}_{np}/\omega', \\ \omega_{np} &= \omega_p - \omega_n, \\ \omega' &= \omega_2 - \omega_1.\end{aligned} \quad (29)$$

## *Susceptibilidad cuadrática*

**Polarizabilidad a segundo orden para sistemas no centrosimétricos:**

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{ijk}^{(2)}(\tilde{\omega}) = & \chi_0 \sum_{npq} \left( \frac{<\hat{x}_i>_{np} <\hat{x}_j>_{pq} <\hat{x}_k>_{qn}}{(\tilde{\omega}_{pn} - 2\tilde{\omega})(\tilde{\omega}_{qn} - \tilde{\omega})} \right. \\ & + \frac{<\hat{x}_i>_{np} <\hat{x}_j>_{pq} <\hat{x}_k>_{qn}}{(\tilde{\omega}_{pn} + \tilde{\omega})(\tilde{\omega}_{qn} - \tilde{\omega})} \\ & \left. + \frac{<\hat{x}_i>_{np} <\hat{x}_j>_{pq} <\hat{x}_k>_{qn}}{(\tilde{\omega}_{pn} + \tilde{\omega})(\tilde{\omega}_{pn} + 2\tilde{\omega})} \right) \end{aligned} \quad (30)$$

$$\chi_0 = \frac{Ne^3 L^3}{2\hbar^2 \omega'^2}, \quad (31)$$

# *Susceptibilidad cuadrática*

## Polarizabilidad a segundo orden para sistemas centrosimétricos

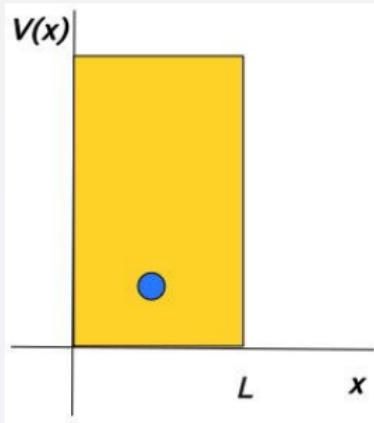
$$\Gamma_{ij}(\omega) = \Gamma_0 \tilde{\Gamma}_{ij}(\tilde{\omega}), \quad (32)$$

donde

$$\begin{aligned}
 \tilde{\Gamma}_{ijkl}(\tilde{\omega}) = & - \sum_{npqr} \left( \frac{<\hat{x}_i>_{np} <\hat{x}_j>_{pq} <\hat{x}_k>_{qr} <\hat{x}_l>_{rn}}{2\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{pn}} \left[ \frac{1}{\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{qn}} + \frac{1}{\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{rn}} \right] \right. \\
 & - \frac{<\hat{x}_i>_{np} <\hat{x}_j>_{pq} <\hat{x}_k>_{qr} <\hat{x}_l>_{rn}}{2\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{qp}} \left[ \frac{1}{\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{qn}} + \frac{1}{\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{np}} \right] \\
 & - \frac{<\hat{x}_i>_{np} <\hat{x}_j>_{pq} <\hat{x}_k>_{qr} <\hat{x}_l>_{rn}}{2\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{rq}} \left[ \frac{1}{\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{nq}} + \frac{1}{\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{rn}} \right] \\
 & \left. + \frac{<\hat{x}_i>_{np} <\hat{x}_j>_{pq} <\hat{x}_k>_{qr} <\hat{x}_l>_{rn}}{2\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{nr}} \left[ \frac{1}{\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{nq}} + \frac{1}{\tilde{\omega} - \tilde{\omega}_{np}} \right] \right) \\
 & .
 \end{aligned} \quad (33)$$

$$\Gamma_0 = \frac{Ne^3 L^4}{2\hbar^2 \omega'^2}, \quad (34)$$

# Pozo de potencial unidimensional



**Potencial de un pozo infinito**

$$V = \begin{cases} 0 & 0 < x < L \\ \infty & x = 0; x = L. \end{cases} \quad (35)$$

**Funciones de onda**

$$\Psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right). \quad (36)$$

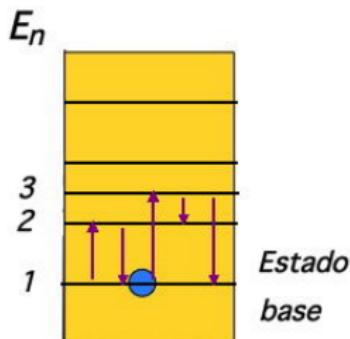
**Energías permitidas**

$$E_n = \hbar\omega_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}n^2. \quad (37)$$

## Valor de expectación de la posición

$$\begin{aligned}
 <\hat{x}>_{nm} &= \frac{2}{L} \int_0^L \sin\left(\frac{n\pi}{L}x\right) x \sin\left(\frac{m\pi}{L}x\right) dx \\
 &= \frac{-mn}{(m^2 - n^2)^2} + \frac{(-1)^{m+n} mn}{(m^2 - n^2)^2}
 \end{aligned} \tag{38}$$

## Frecuencias de transición



$$\begin{aligned}
 \omega_{np} &= \omega_p - \omega_n \\
 &= \frac{\pi^2 \hbar}{2mL^2} (p^2 - n^2). \tag{39}
 \end{aligned}$$

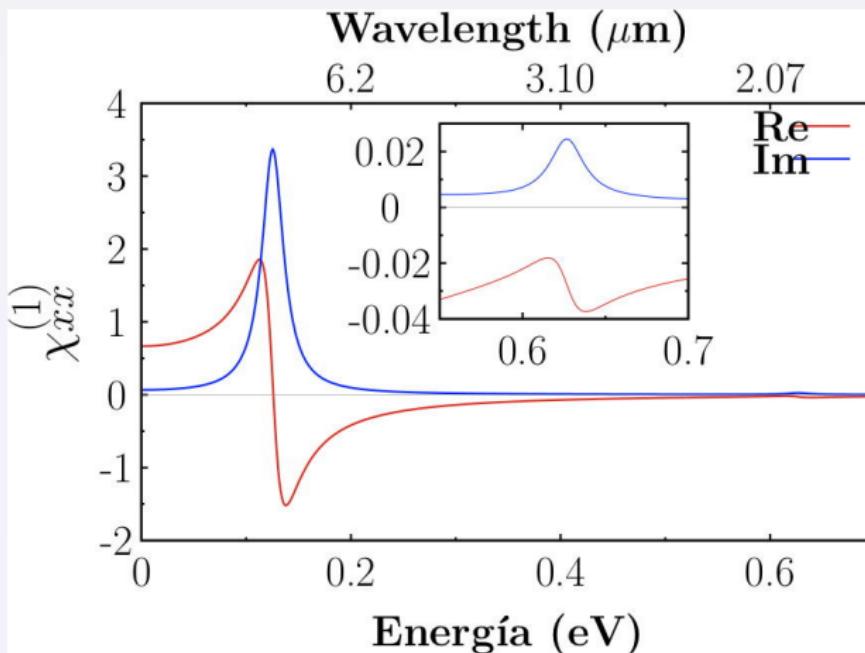
*¿Qué se requiere para el cálculo de las susceptibilidades?*

- **Funciones de onda del sistema:**  $\psi_n(\mathbf{r})$ .
- **Estados energéticos del sistema:**  $E_n$ .
- **Evaluar los elementos de matriz de la posición:**  $\langle n | \hat{x} | m \rangle$
- **Evaluar los términos involucrados en las expresiones respectivas de las susceptibilidades sobre todos los estados del sistema.**

# *Susceptibilidad lineal*

**Susceptibilidad lineal de un pozo infinito.**

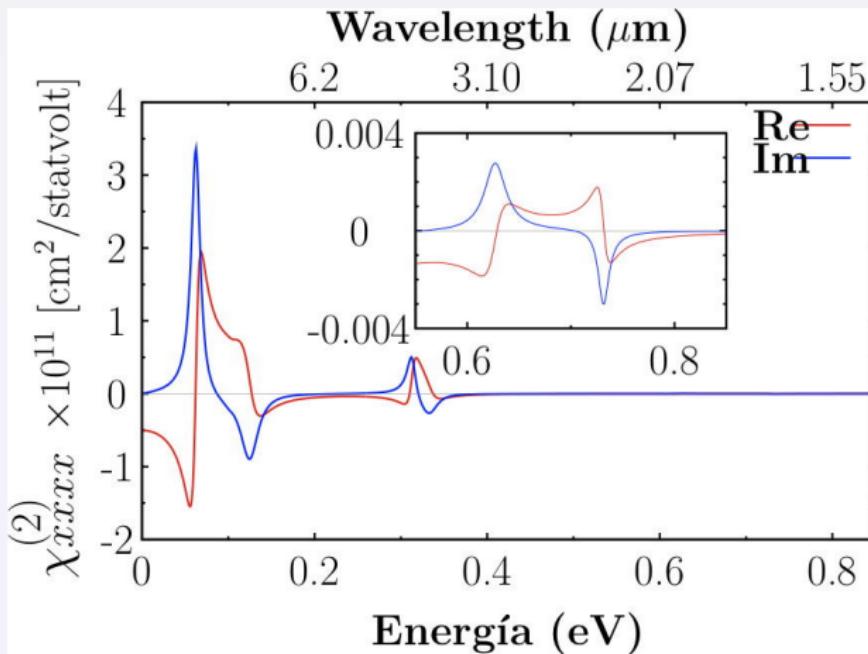
$$L = 30 \text{ \AA}; \quad N_e = 10^{20} \text{ cm}^3.$$



# *Susceptibilidad no lineal*

**Susceptibilidad lineal de un pozo infinito.**

$$L = 30 \text{ \AA}; \quad N_e = 10^{20} \text{ cm}^3.$$



# *Infraestructura*

## *“Cluster” de cómputo*

- 14 nodos **quad-core** duales (**112 núcleos**) Intel Xeon de 64 bits y con 12 Gb de memoria RAM.
- 36 nodos **six-core** duales (**432 núcleos**) Intel Xeon de 64 bits y con 48 Gb de memoria RAM.



## Conclusiones

- Sistemas de pozo de potencial cuánticos se pueden fabricar con capas de compuestos semiconductores.
- Es posible calcular las susceptibilidad lineal y no lineal de sistemas confinados.
- Para un pozo de potencial infinito y anchura de 30 Å, se encuentra que su respuesta lineal presenta un pico de absorción correspondiente a transiciones alrededor 125 meV. Mientras que la parte imaginaria de la susceptibilidad no lineal, presenta picos correspondientes a las transiciones  $\omega$  y  $2\omega$  alrededor de 62 y 125 meV.

**Gracias por su atención**

# Espectro EM

