



## CIENCIAS NATURALES Y EXACTAS

### Artículo original de investigación

# Métodos basados en la propagación de trayectorias para el estudio de la dinámica cuántica ultrarápida

Llinersy Uranga Piña <sup>1\*</sup> <https://orcid.org/0000-0001-5837-7204>  
Lidice Cruz Rodríguez <sup>1</sup> <https://orcid.org/0000-0003-3432-8568>  
Aliezer Martínez Mesa <sup>1</sup> <https://orcid.org/0000-0002-0443-6106>  
Christoph Meier <sup>2</sup> <https://orcid.org/0000-0003-4957-4868>  
Annika Bande <sup>3</sup> <https://orcid.org/0000-0003-3827-9169>  
Matthias Berg <sup>3</sup> <https://orcid.org/0000-0002-1296-2683>  
Jean Christophe Tremblay <sup>4</sup> <https://orcid.org/0000-0001-8021-7063>  
Juan Carlos Acosta Matos <sup>5</sup> <https://orcid.org/0000-0002-7927-3292>

<sup>1</sup> Universidad de la Habana. La Habana, Cuba

<sup>2</sup> Universidad de Toulouse III. Toulouse, Francia

<sup>3</sup> Centro Helmholtz. Berlín, Alemania

<sup>4</sup> Universidad de Lorraine. Lorraine, Francia

<sup>5</sup> Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear. La Habana, Cuba

\*Autor para la correspondencia: [llinersy@fisica.uh.cu](mailto:llinersy@fisica.uh.cu)

## RESUMEN

### Revisores<sup>a</sup>

### Editor

Amanda Gómez Bahamonde  
Academia de Ciencias de Cuba.  
La Habana, Cuba

### Traductor

Yoañ Karell Acosta González  
Academia de Ciencias de Cuba.  
La Habana, Cuba

<sup>a</sup> N. del E.: En este apartado figuran los nombres de los árbitros que accedieron a revelar su identidad, como expresión de apertura progresiva del proceso de revisión por pares. No aparecen aquellos que optaron por el anonimato

**Introducción.** Se desarrollaron métodos novedosos para la simulación computacional de la dinámica cuántica ultrarápida en sistemas moleculares. Éstos fueron utilizados en el estudio de una amplia variedad de procesos dinámicos fotoinducidos en átomos, moléculas y sólidos. **Métodos.** La nueva metodología ha establecido una correspondencia entre el sistema cuántico original y un sistema clásico equivalente con un número mayor de dimensiones. Las ecuaciones de movimiento resultantes fueron integradas numéricamente utilizando algoritmos de paso de tiempo variable, los observables calculados fueron comparados con los resultados de la propagación de paquetes de onda. **Resultados.** La nueva metodología ha reproducido efectos cuánticos paradigmáticos como la energía de punto cero, el efecto túnel y la interferencia cuántica; su exactitud y eficiencia numérica ha superado las de otras herramientas computacionales disponibles en la actualidad. Se describieron correctamente fenómenos tan diversos como la fotoionización de un átomo por un pulso láser ultracorto, la predisociación vibracional de complejos de *van der Waals*, la dinámica electrónica en puntos cuánticos y la fotoexcitación de átomos de metales alcalinos en matrices de gases nobles. **Conclusiones.** La simulación de la dinámica cuántica de átomos, moléculas y sólidos demostró que las predicciones del método basado en la propagación de trayectorias interactuantes se han encontrado en excelente correspondencia con los observables calculados a partir de la solución directa de la ecuación de Schrödinger y con los datos experimentales disponibles. Adicionalmente, el método ha proporcionado una representación intuitiva de los procesos dinámicos, ya que las trayectorias han coincidido con las líneas de flujo de la densidad de probabilidad cuántica.



## Trajectory-based methods for the study of ultrafast quantum dynamics

### ABSTRACT

---

**Introduction.** We developed and implemented novel methods for the computer simulation of ultrafast quantum dynamics in molecular systems, which were subsequently applied in the investigation of a wide variety of photoinduced dynamical processes in atoms, molecules and solids. **Methods.** The new methodology maps the dynamics of the original quantum system into that of an equivalent classical system with larger dimensionality. The resulting equations of motion were integrated numerically using algorithms with adaptive time step. The computed observables were compared with the results obtained via wavepacket propagation. **Results and discussion.** The methodology reproduces paradigmatic quantum effects such as zero-point energy, tunnel effect and quantum interference; its accuracy and numerical efficiency surpasses those of alternative computational tools available nowadays. It accounts correctly for phenomena as diverse as the photoionization of an atom by an ultrashort laser pulse, the vibrational predissociation of van der Waals complexes, the electron dynamics in quantum dots and the photoexcitation of alkali metal atoms in rare gas matrices. **Conclusions.** It was concluded that the simulation of the quantum dynamics of atoms, molecules and solids has shown that the predictions of the interacting trajectory propagation scheme are in excellent agreement with the observables calculated from the direct solution of the Schrödinger equation, and with the available experimental data. Additionally, the method provides an intuitive representation of the dynamical processes, since the trajectories follow the flux lines of the quantum probability density.

**Keywords:** quantum dynamics; quantum trajectory method; photoionization; vibrational predissociation

---

## INTRODUCCIÓN

La investigación de la dinámica en tiempo real de sistemas de muchos cuerpos ha constituido uno de los principales desafíos en la física contemporánea. El desarrollo de pulsos láser ultracortos, primero en la escala de los femtosegundos y más recientemente en la escala de los atosegundos, ha permitido obtener una gran cantidad de información dinámica que no se encontraba disponible anteriormente. <sup>(1)</sup> La interpretación de esos experimentos ha requerido de simulaciones teóricas detalladas, que a su vez han exigido la incorporación de la naturaleza cuántica del movimiento atómico.

A pesar del progreso experimentado por los métodos más sofisticados para la propagación de paquetes de ondas y el incremento continuo de los recursos computacionales disponibles, no ha sido posible describir rigurosamente la dinámica cuántica de los sistemas moleculares con más de unos pocos átomos. Como consecuencia, el desarrollo de nuevos métodos para la simulación computacional de la dinámica

cuántica en espacios de muchas dimensiones ha constituido un campo activo de investigación, con ramificaciones más allá de la física atómica o molecular.

Se han hecho grandes esfuerzos para desarrollar nuevos métodos basados en la propagación de trayectorias, cuyo costo computacional ha sido considerablemente menor que el de las técnicas estándares de propagación de paquetes de ondas. Dentro de este contexto, un enfoque atractivo lo ha constituido la formulación hidrodinámica de mecánica cuántica, donde la evolución temporal de un ensemble de trayectorias ha sido descrita mediante una ecuación similar a la de Hamilton-Jacobi. <sup>(2)</sup> La dinámica de las llamadas trayectorias cuánticas –que aparecen dentro de esta formulación– se ha regido tanto por las fuerzas de interacción como por las fuerzas cuánticas. Estas últimas han sido las responsables de reproducir todos los efectos no locales en la dinámica cuántica.

Sin embargo, durante la propagación de las trayectorias cuánticas han surgido dificultades numéricas, principalmente

debido a la necesidad de evaluar las derivadas espaciales de los campos hidrodinámicos en una malla no estructurada y a la inestabilidad de las aproximaciones numéricas para el cálculo del potencial cuántico en la vecindad de los nodos de las funciones de onda. <sup>(2)</sup>

En este trabajo se desarrolló un modelo teórico y computacional basado en la propagación de trayectorias cuánticas, para estudiar la dinámica cuántica de procesos ultrarápidos sin hacer uso de funciones de onda. Dentro de la nueva metodología, que hemos denominado representación de trayectorias interactuantes (RTI), el efecto del potencial cuántico sobre la dinámica se ha representado a través de las interacciones efectivas entre las pseudopartículas del ensemble. La RTI fue utilizada en el estudio de una amplia variedad de procesos dinámicos fotoinducidos en átomos, moléculas y sólidos, obteniéndose resultados en excelente correspondencia con los resultados experimentales disponibles para los sistemas objeto de estudio y los obtenidos mediante la propagación de paquetes de onda.

## MÉTODOS

### Sistemas objeto de estudio

La RTI se aplicó a un conjunto de sistemas cuánticos modelos, incluyendo sistemas ligados y problemas de dispersión (por ejemplo oscilador armónico, potencial de Morse, transmisión a través de barreras de Eckart y con forma de rampa ascendente). Adicionalmente, el método se utilizó en el estudio de procesos dinámicos más complejos, como la fotoionización de un átomo por un pulso láser ultracorto, la predisociación vibracional de complejos de *van der Waals*, la dinámica electrónica en puntos cuánticos y la fotoexcitación de átomos de metales alcalinos en matrices de gases nobles.

En la fotoionización de un átomo de hidrógeno por pulsos láser ultracortos e intensos se han puesto de manifiesto los efectos de la fase relativa entre la envolvente del pulso y la onda portadora. En este trabajo se investigó la influencia de esta diferencia de fase sobre las magnitudes accesibles experimentalmente: la probabilidad de ionización y la asimetría de la distribución de los electrones emitidos.

El análisis de la predisociación vibracional del complejo  $\text{ArBr}_2$  se ha restringido a la geometría en forma de T, debido a la mayor disponibilidad de datos experimentales para este isómero con respecto a la configuración lineal. <sup>(3)</sup>

Adicionalmente, se ha considerado un sistema compuesto por 2 puntos cuánticos cargados en un nanoalambre de galio-arsénico. Dentro de la aproximación de masa efectiva (para una sola banda), la influencia de la estructura electrónica del material semiconductor se ha tenido en cuenta a través de la masa efectiva de los electrones y la permitividad eléctrica relativa. <sup>(4)</sup>

Para el estudio de la fotoexcitación de átomos de sodio embebidos en matrices de gases nobles (argón, criptón) se consideró explícitamente el movimiento de la impureza y de 863 átomos de gas noble a su alrededor (con un total de 2592 grados de libertad) sometidos a condiciones de frontera periódicas.

### Propagación de trayectorias cuánticas

La RTI ha permitido describir la dinámica cuántica a través de un sistema clásico equivalente que ha evolucionado en un espacio de configuraciones con un número mayor de dimensiones. La característica fundamental del método ha sido la parametrización de la densidad de probabilidad utilizando las posiciones de un conjunto N de trayectorias, lo que ha conducido a un esquema numéricamente estable para la evaluación del potencial cuántico. <sup>(5)</sup> En cada instante de tiempo, los valores esperados de las magnitudes físicas se han calculado promediando sobre las trayectorias individuales.

Las ecuaciones de movimiento para las trayectorias cuánticas fueron resueltas empleando algoritmos de propagación de paso de tiempo variable: el método de Runge-Kutta de cuarto orden y el método predictor-corrector de Adams-Moulton de cuarto orden. <sup>(6)</sup> De esta forma se garantizó la conservación de la energía con una precisión relativa de  $10^{-12}$  y se estudió la convergencia de los resultados de la simulación para un número creciente de trayectorias cuánticas.

Alternativamente, se investigó la posibilidad de representar los campos hidrodinámicos aprovechando las propiedades de convergencia (global) de los polinomios de Chebyshev. En la práctica, el número de trayectorias cuánticas suele ser mayor que el orden máximo de los polinomios utilizados para representar los campos. Por lo tanto, los coeficientes del desarrollo fueron obtenidos resolviendo un sistema de ecuaciones lineales sobredeterminado, utilizando el algoritmo de descomposición en valores singulares. Los coeficientes del desarrollo de las derivadas de los campos se evaluaron a partir de las relaciones de recurrencia de los polinomios de Chebyshev.

### Propagación de paquetes de ondas

La ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo se resolvió utilizando el método de descomposición del operador de evolución temporal (para sistemas unidimensionales) y el método de Hartree multiconfiguracional dependiente del tiempo (para sistemas con varios grados de libertad). Esto permitió aprovechar las ventajas numéricas relativas de cada uno de estos esquemas. Se comprobó que las predicciones de ambas metodologías coincidían para el caso de los sistemas unidimensionales.

En el método de Hartree multiconfiguracional dependiente del tiempo, la función de onda del sistema se ha representado como una superposición de productos de funciones uniparticulares. Tanto las funciones de onda uniparticulares como los coeficientes en la sumatoria han dependido explícitamente del tiempo, lo que ha proporcionado gran flexibilidad al método para representar la dinámica cuántica. Las ecuaciones de movimiento correspondientes se han derivado utilizando el principio variacional de Dirac-Frenkel. <sup>(7)</sup>

En las simulaciones de la dinámica de electrones en puntos cuánticos en semiconductores, el ancho de la resonancia excitada inicialmente se obtuvo mediante el ajuste exponencial del módulo al cuadrado de la función de autocorrelación. El proceso de autoionización se estudió en el marco de la regla de oro de Fermi dependiente del tiempo. Este modelo se ha basado en la definición de un paquete de ondas y un hamiltoniano efectivo, que se obtuvo integrando las funciones y operadores de 2 partículas sobre las coordenadas del electrón que permanece ligado. En este caso el ancho de la resonancia se calculó como la transformada de Fourier de la función de autocorrelación de la proyección del paquete de ondas efectivo en los estados del continuo. <sup>(4)</sup>

## RESULTADOS Y DISCUSIÓN

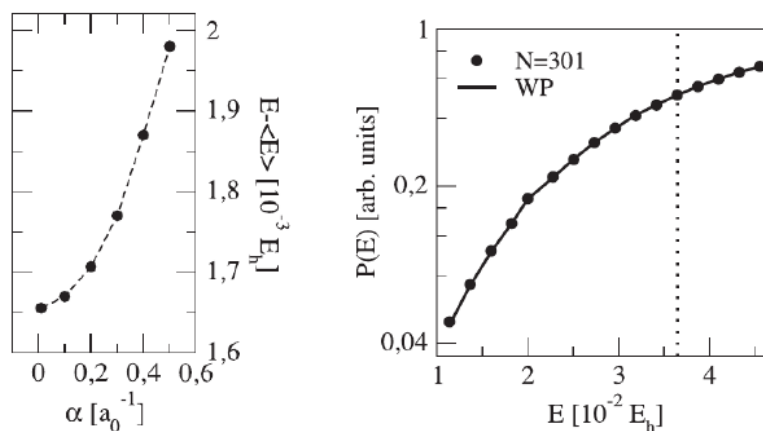
La aplicación de la RTI a una amplia variedad de sistemas modelos unidimensionales ha permitido demostrar la capacidad de este método para reproducir efectos cuánticos paradigmáticos como la energía de punto cero en potenciales armónicos y anarmónicos, la transmisión a través de barreras de potencial de distintas formas, las funciones de autocorre-

lación y los espectros de energía. En todos los casos se alcanzó la convergencia numérica para unos pocos cientos de trayectorias. <sup>(5)</sup>

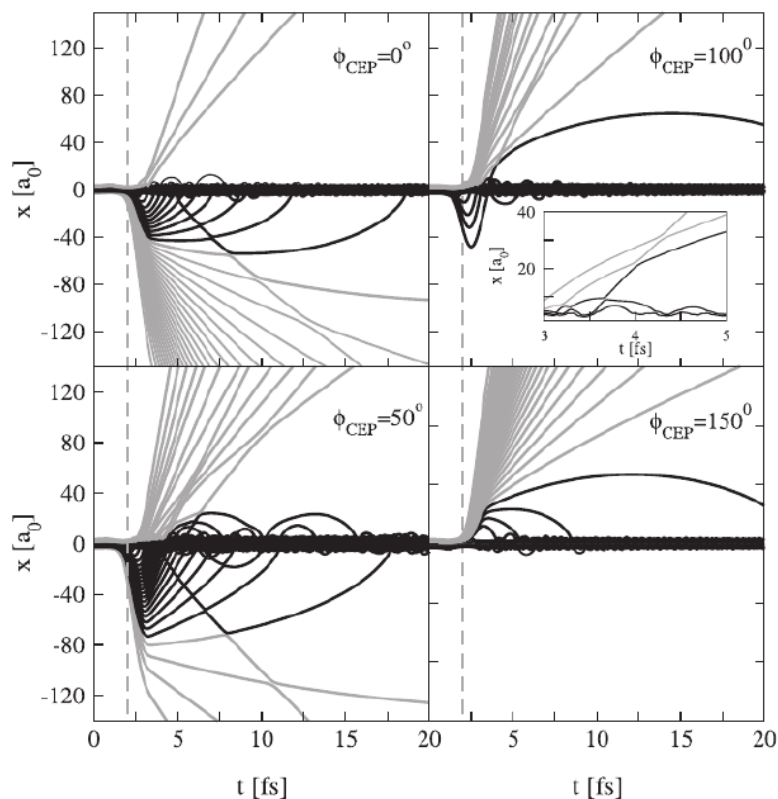
Por ejemplo, en la figura 1 (panel izquierdo) se muestra el incremento del error en el cálculo de la energía de punto cero al aumentar la anarmonicidad del potencial de interacción. Al variar el parámetro de anarmonicidad  $\alpha$ , el número de niveles ligados que soportó el potencial decreció desde  $N_b = 10^4$  (para  $\alpha = 0,01$ ) hasta  $N_b = 3$  (para  $\alpha = 0,5$ ), lo que ha ilustrado el amplio rango de valores de la anarmonicidad explorado. Sin embargo, el error relativo en la determinación de la energía del estado vibracional fundamental se mantuvo por debajo del 5 %.

En la figura 1 (panel derecho) se muestra una excelente correspondencia entre las probabilidades de transmisión a través de una barrera de Eckart, calculadas utilizando la RTI y mediante la propagación de paquetes de ondas. La propagación de las trayectorias cuánticas ha sido capaz de reproducir la transmisión por efecto túnel (para energías de colisión por debajo de la altura de la barrera) y la probabilidad de reflexión mecánico-cuántica (para energías por encima de la altura de la barrera).

Para los pulsos láser de gran intensidad, cuya duración equivale a unos pocos ciclos ópticos, la variación de la fase relativa de la onda portadora con respecto a la envolvente del pulso ha provocado cambios drásticos en la dinámica de ionización de los átomos. La RTI reprodujo cuantitativamente los efectos de la diferencia de fase envolvente-onda portadora  $\Phi_{CEP}$  sobre la probabilidad de ionización total y la asimetría en las direcciones de emisión. <sup>(8)</sup> En la figura 2 se ilustra esta dependencia para el caso de la fotoionización de un átomo de



**Fig. 1.** Panel izquierdo: desviación de la energía promedio  $\langle E \rangle$  de un ensemble de  $N=301$  trayectorias cuánticas, respecto al valor exacto de la energía  $E$  del estado básico, en función de la anarmonicidad del potencial de interacción. Panel derecho: probabilidad de transmisión a través de una barrera de Eckart, en función de la energía inicial del paquete de ondas. Los círculos representan las predicciones de la RTI, la curva continua (WP) es el resultado cuántico exacto. La línea vertical indica la altura de la barrera.



**Fig. 2.** Evolución de las trayectorias cuánticas para diferentes valores de la diferencia de fase envolvente-onda portadora  $\phi_{\text{CEP}}$ . Las curvas grises y negras corresponden a las trayectorias que se disocian y a las que permanecen ligadas, respectivamente. La línea discontinua vertical indica el centro del pulso láser.

hidrógeno, provocada por un pulso láser con una duración de 1.5 ciclos ópticos, una longitud de onda de 800 nm y una intensidad de  $3,51 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ . Se observa que la emisión ocurre preferentemente en la dirección positiva o negativa del eje  $x$ , dependiendo del valor específico de la diferencia de fase  $\phi_{\text{CEP}}$ .

En la molécula  $\text{ArBr}_2$ , tras la fotoexcitación del nivel  $v = 24$ , coexistieron 2 vías mediante las cuales ocurrió la relajación vibracional. Estas consistieron en la transferencia de población hacia los niveles  $v = 23$  y  $v = 25$ , seguida de la pérdida secuencial de un cuanto de vibración hasta llegar al estado vibracional  $v = 21$ . La escala de tiempo de la predissociación vibracional calculada dentro del marco de la RTI (22,9 ps) ha coincidido con el valor experimental reportado para este proceso ( $22 \pm 2$  ps).<sup>(3)</sup>

El análisis de la evolución de las trayectorias cuánticas reveló que el mecanismo de disociación comprende 3 fases:

- Durante los primeros 10 ps, el paquete de ondas realizó oscilaciones de pequeña amplitud, acompañadas por un lento incremento del ancho de la distribución.
- Entre 10 ps y 13 ps tras la fotoexcitación se aceleró la transferencia de energía desde la molécula diatómica

hacia el modo de *van der Waals* y la distribución se ensanchó significativamente.

- Después de transcurridos 13 ps, las trayectorias externas comenzaron a abandonar irreversiblemente las proximidades de la molécula de  $\text{Br}_2$ .

Las vibraciones moleculares fueron estudiadas mediante la solución de las ecuaciones de movimiento para los campos hidrodinámicos (la densidad de probabilidad y la fase de la función de onda), representados a través de sendos desarrollos en polinomios de Chebyshev. La evolución temporal de las distribuciones de probabilidad y los observables, calculados mediante este método, reprodujeron fielmente las soluciones de la ecuación de Schrödinger para potenciales armónicos y anarmónicos (de Morse) utilizando un número relativamente bajo de términos en el desarrollo.<sup>(9)</sup> El truncamiento de la serie de Chebyshev provocó una atenuación ligera de las variaciones del potencial cuántico, pero este efecto no afectó significativamente la fuerza total que actuó sobre cada trayectoria. Este nivel de correspondencia indicó la factibilidad de la extensión de esta metodología al caso de problemas multidimensionales.



La RTI ha permitido predecir con exactitud la probabilidad de autoionización de pares de puntos cuánticos cargados. Para distancias entre los puntos cuánticos menores que 150 nm, las correlaciones electrónicas de corto alcance han jugado un papel más importante que el movimiento lateral de los electrones. Sin embargo, para separaciones mayores, la inclusión de los grados de libertad perpendiculares al eje del nanoalambre ha resultado ser más relevante que los efectos de las correlaciones. La RTI ha permitido visualizar las líneas de flujo de la densidad de probabilidad y de esa forma, caracterizar la direccionalidad del proceso de emisión (figura 3) y el mecanismo mediante el cual ocurre la ionización, tanto en el tratamiento explícito de la dinámica de los 2 electrones como en la descripción del movimiento del electrón activo en el marco de la regla de oro de Fermi dependiente del tiempo. <sup>(4)</sup>

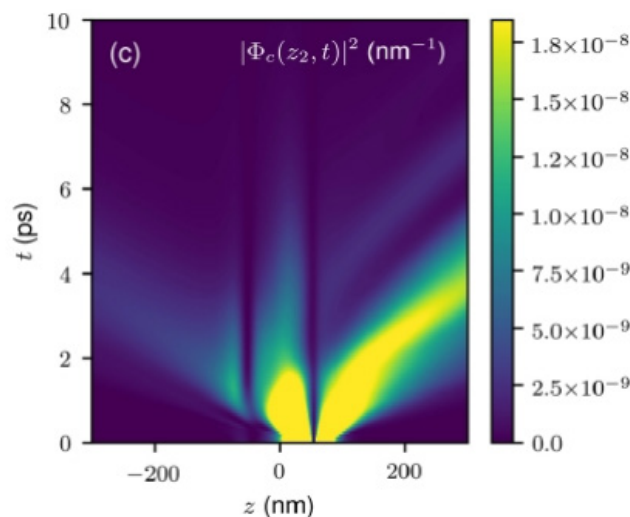
La simulación de la fotoexcitación de átomos de sodio embebidos en matrices de argón y criptón y la dinámica de reestructuración de la matriz como consecuencia del cambio en la distribución de la impureza, demostró la fiabilidad de la representación mediante trayectorias interactuantes de la dinámica cuántica de sistemas con muchos grados de libertad. Las bandas de absorción calculadas utilizando la RTI mejoraron notablemente la correspondencia con las posiciones de los picos, determinadas experimentalmente con respecto a los resultados obtenidos empleando otras técnicas de simulación. La RTI también predijo la estructura de la matriz dopada y la amplitud de las vibraciones alrededor de los sitios del cristal de acuerdo con los valores experimentales reportados. <sup>(10)</sup>

## Conclusiones

La representación de trayectorias cuánticas interactuantes se aplicó a un conjunto de sistemas cuánticos modelos, incluyendo sistemas ligados y problemas de dispersión. Para los sistemas ligados se obtuvieron de manera muy precisa tanto la densidad del estado básico como la energía de punto cero. En el caso de la dispersión, se encontraron coeficientes de transmisión y densidades dependientes del tiempo muy similares a los obtenidos a partir de los métodos estándares de cálculos cuánticos. Finalmente, se mostró que la síntesis de la función de onda a lo largo de las trayectorias ha permitido evaluar las funciones de correlación y el espectro de energías del sistema.

La investigación de la dinámica vibracional mediante la propagación de trayectorias cuánticas en el sistema de referencia de Lagrange reveló que se ha requerido un número relativamente pequeño de polinomios de Chebyshev para representar los campos hidrodinámicos con exactitud suficiente. Esta característica ha resultado muy atractiva con vistas a la extensión del algoritmo para la descripción de la dinámica cuántica en sistemas moleculares con varios grados de libertad.

La RTI se aplicó en el estudio de fenómenos fotoinducidos en sistemas moleculares con un número creciente de grados de libertad: la ionización de un átomo de hidrógeno por un pulso láser ultracorto, la predisociación vibracional de un complejo de *van der Waals* triatómico, la dinámica electrónica en pares de puntos cuánticos en semiconductores y la



**Fig. 3.** Evolución de la proyección en el continuo del paquete de ondas efectivo que describe al electrón emitido, durante los primeros 10 ps después de la fotoexcitación de un par de puntos cuánticos separados a una distancia de 108,3 nm. La ionización ocurrió preferentemente hacia la derecha.

fotoexcitación de átomos de metales alcalinos embebidos en matrices de gases nobles. Se demostró que la RTI basada en la propagación de trayectorias, únicamente ha sido capaz de describir correctamente el proceso de fotoionización inducido por el láser, además de reproducir los efectos de las diferencias de fase entre los componentes monocromáticos del pulso láser sobre el espectro fotoelectrónico. Adicionalmente, las predicciones de la presente metodología han demostrado una buena correspondencia con los datos experimentales disponibles para la probabilidad de ocurrencia de la predisociación vibracional y los espectros de absorción de los sistemas bajo estudio. El método también proporcionó una representación intuitiva del proceso cuántico dependiente del tiempo.

## REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Krausz F, Ivanov M. Attosecond physics. Rev. Mod. Phys. 2009; 81(1), 163-234. Disponible en: <https://journals.aps.org/rmp/abstract/10.1103/RevModPhys.81.163>
2. Wyatt RE. Quantum Dynamics with Trajectories. 1ra. ed. New York: Springer-Verlag; 2006. Disponible en: <https://link.springer.com/book/10.1007/0-387-28145-2>
3. Acosta-Matos J.C, Martínez-Mesa A, Uranga-Piña L. Trajectory-based modelling of the quantum dynamics of vibrational predissociation: Application to the Ar...Br<sub>2</sub> (v=24) complex. Chem. Phys. 2020; 529(1), 110544-6. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0301010419307062>
4. Berg M, Uranga-Piña L, Martínez-Mesa A, Bande A. Wavepacket golden rule treatment of interparticle Coulombic decay in paired quantum dots. Chem. Phys. 2019; 151(24), 244111-12. Disponible en: <https://aip.scitation.org/doi/abs/10.1063/1.5131849>
5. Cruz-Rodríguez L, Uranga-Piña L, Martínez-Mesa A, Meier C. Quantum dynamics modeled by interacting trajectories. Chem. Phys. Lett. 2018; 503(1), 39-49. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0301010417308558>
6. Frenkel D, Smit B. Understanding molecular simulation. 2da. ed. Cambridge: Academic Press; 2002. Disponible en: <https://www.elsevier.com/books/understanding-molecular-simulation/frenkel/978-0-12-267351-1>
7. Meyer H.D, Gatti F, Worth G.A. Multidimensional Quantum Dynamics: MCTDH Theory and Applications, Weinheim: Wiley VCH; 2009. Disponible en: <https://www.wiley.com/en-us/Multidimensional+Quantum+Dynamics:+MCTDH+Theory+and+Applications-p-9783527320189>
8. Cruz-Rodríguez L, Uranga-Piña L, Martínez-Mesa A, Meier C. Quantum trajectory study of laser-driven atomic ionization. Chem. Phys. Lett. 2019; 715(1), 211-216. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0009261418309527>
9. Cruz-Rodríguez L, Tremblay J.C, Martínez-Mesa A, Uranga-Piña L. A Chebyshev expansion of hydrodynamical fields for ultrafast vibrational wave packet dynamics. Comput. Theor. Chem. 2016; 1078(1), 104-112. Disponible en: <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S2210271X16000116>

10. Cruz-Rodríguez L. Trajectory-based methods for the study of ultrafast quantum dynamics. Tesis de Doctorado, Universidad de la Habana (2019)

Recibido: 13/07/2021

Aprobado: 23/11/2021

## Agradecimientos

Los autores agradecen el uso del *cluster* de computadoras DIRAC del Centro Helmholtz de Berlín.

## Conflicto de intereses

Los autores declaran que no existen conflictos de intereses en relación con la investigación reportada en este artículo.

## Contribuciones de los autores

Conceptualización: Llinersy Uranga Piña, Aliezer Martínez Mesa, Christoph Meier

Curación de datos: Llinersy Uranga Piña, Aliezer Martínez Mesa

Análisis formal: Llinersy Cruz Rodríguez, Matthias Berg, Juan Carlos Acosta Matos

Adquisición de fondos: Llinersy Uranga Piña, Aliezer. Martínez Mesa, Christoph Meier, Annika Bande

Investigación: Llinersy Uranga Piña, Lidice Cruz Rodríguez, A. Martínez Mesa, M. Berg, Jean Christophe Tremblay, Juan Carlos Acosta Matos  
Metodología: Llinersy Uranga Piña, Aliezer Martínez Mesa, C. Meier, Aliezer Bande, Jean Christophe Tremblay

Administración del proyecto: Llinersy Uranga Piña, Aliezer Martínez Mesa, Christoph Meier, A. Bande, Jean Christophe Tremblay

Software: Llinersy Uranga Piña, L. Cruz Rodríguez, Aliezer Martínez Mesa, Christoph Meier, Annika Bande, Matthias Berg, Jean Christophe Tremblay, J. C. Acosta Matos

Supervisión: Llinersy Uranga Piña, Aliezer Martínez Mesa

Validación: Lidice Cruz Rodríguez, Matthias Berg, Juan Carlos Acosta Matos

Visualización: Llinersy Uranga Piña, Lidice Cruz Rodríguez, Aliezer Martínez Mesa, Matthias Berg, Jean Christophe Tremblay

Redacción – borrador original: Lidice Cruz Rodríguez, Aliezer Martínez Mesa, Matthias. Berg

Redacción – revisión y edición: Llinersy Uranga Piña, Aliezer Martínez Mesa, Christoph Meier, Annika Bande, Jean Christophe Tremblay

## Financiación

Esta investigación fue financiada parcialmente por las siguientes instituciones: la Fundación Volkswagen, Sociedad Alemana de Investigaciones, Agencia Nacional de Investigación de Francia, embajada francesa en Cuba, Centro de Cooperación Internacional de la Universidad Libre de Berlín, Programa Nacional de Ciencias Básicas de Cuba y el Centro Internacional de Física Teórica Abdus Salam.

## Cómo citar este artículo

Uranga Piña L, Cruz Rodríguez L, Martínez Mesa A, Meier C, *et al.* Métodos basados en la propagación de trayectorias para el estudio de la dinámica cuántica ultrarápida. AnAcadCiencCuba [internet] 2022 [citado en día, mes y año];12(3):e1122. Disponible en: <http://www.revistaccuba.cu/index.php/revacc/article/view/1122>

