

ANÁLISIS COMPUTACIONAL DEL EFECTO STARK EN CLÚSTERES LINEALES DE
PUNTOS CUÁNTICOS

LUCAS RUEDA RODRÍGUEZ

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

FÍSICA

BUCARAMANGA

2024

ANÁLISIS COMPUTACIONAL DEL EFECTO STARK EN CLÚSTERES LINEALES DE
PUNTOS CUÁNTICOS

LUCAS RUEDA RODRÍGUEZ

Proyecto de grado para optar al título de Físico

Director

Dr. Willian Gutiérrez Niño

Doctorado en Ciencias Naturales - Física

Codirector

Dr. Ilya Davidovich Mikhailov

Doctorado en Física

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

FÍSICA

BUCARAMANGA

2024

DEDICATORIA

Dedicado a mi amigo Francisco Samuel por ayudarme a aprender a programar.

AGRADECIMIENTOS

Agradecimientos a mis padres, mi hermano y al resto de mi familia por su apoyo.

CONTENIDO

	pág.
1 INTRODUCCIÓN	12
2 OBJETIVOS.	15
2.1 OBJETIVO GENERAL	15
2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS.	15
3 ESTADO DEL ARTE	16
4 MARCO TEÓRICO.	19
4.1 Puntos Cuánticos	19
4.2 Aplicaciones.	21
5 MODELO MATEMÁTICO	24
5.1 Modelo básico del sistema	24
5.2 Definición del Hamiltoniano	26
5.3 Método de expansión de series de Fourier	28
6 EXPERIMENTOS Y RESULTADOS	31
6.1 Clúster homogéneo lineal de QDs	33
6.1.1 Electrón libre	34
6.1.2 Electrón ligado a donadora	36
6.2 Clúster con QD central de mayor tamaño	38
6.2.1 Electrón libre	39
6.2.2 Electrón ligado a donadora	40

6.3	Clúster con QD central de menor tamaño	42
6.3.1	Electrón libre	42
6.3.2	Electrón ligado a donadora	43
7	CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES	45
7.1	CONCLUSIONES	45
7.2	RECOMENDACIONES	47
	BIBLIOGRAFÍA	49

LISTA DE FIGURAS

		pág.
Figura 1	Número de publicaciones por año.	16
Figura 2	Imágenes de una nanoestructura lineal de QDs generados por el proceso de autoensamblado	20
Figura 3	Ejemplo de qubit de 4 QDs.	23
Figura 4	Imagen del modelo y el potencial aplicado	24
Figura 5	Secciones transversales de un clúster lineal y su potencial.	31
Figura 6	Imagen de un QDC de 9 QDs equidistantes y de igual tamaño $R = 2$	34
Figura 7	Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón libre en el sistema de 9 QDs equidistantes y de igual tamaño $R = 2$	34
Figura 8	Energía de absorción para el electrón libre en el estado base para el sistema de 9 QDs equidistantes y de igual tamaño $R = 2$	35
Figura 9	Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón ligado en el sistema de 9 QDs equidistantes y de igual tamaño $R = 2$	36
Figura 10	Energía de absorción y de enlace en el estado base para el sistema de 9 QDs equidistantes y de igual tamaño $R = 2$	37
Figura 11	Imagen de un QDC de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 3$	39
Figura 12	Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón libre en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 3$	39
Figura 13	Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón ligado en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 3$	41

Figura 14	Energía de absorción y de enlace en el estado base en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 3$	41
Figura 15	Imagen de un QDC de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 1.9$	42
Figura 16	Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón libre en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 1.9$	43
Figura 17	Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón ligado en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 1.9$	44
Figura 18	Energía de absorción y de enlace en el estado base en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 1.9$	45

LISTA DE APÉNDICES

	pág.
A Demostración de la normalización de las funciones base exponenciales.	54
B Demostración de la fórmula del hamiltoniano	54
C Demostración de la relación entre la transformada de Fourier y la serie de Fourier en forma compleja	57

RESUMEN

TÍTULO: ANÁLISIS COMPUTACIONAL DEL EFECTO STARK EN CLÚSTERES LINEALES DE PUNTOS CUÁNTICOS.

AUTOR: Lucas Rueda Rodríguez, Facultad de ciencias, escuela de física, física. Willian Gutiérrez Niño, Doctorado en Ciencias Naturales - Física. Iliá Davidovich Mikhailov, Doctorado en Física.

PALABRAS CLAVE: Puntos cuanticos acoplados lateralmente, Clusteres de puntos cuanticos ordenados y desordenados, espectro energetico de un electron y una donadora, efecto Stark no lineal, momento dipolar y polarizabilidad inducida.

DESCRIPCIÓN: Se estudian las consecuencias de aplicar un campo eléctrico leve a un clúster lineal de puntos cuánticos circulares usando un método computacional basado en series de Fourier. Se analizan las energías, momentos dipolares y polarizabilidades para tres configuraciones estructurales diferentes caracterizadas por el radio del punto cuántico central respecto al tamaño de los demás puntos cuánticos, evidenciando la aparición del efecto Stark no lineal y las variaciones que la morfología del sistema provoca en el valor del campo crítico. Se calcula también los efectos de introducir una impureza donadora al punto central, observando el aumento del potencial de confinamiento que hace requerir un campo mayor para poder observar el efecto Stark no lineal, evidenciando una forma de detectar la presencia de impurezas en este tipo de clústeres.

ABSTRACT

TITLE: COMPUTATIONAL ANALYSIS OF THE STARK EFFECT ON LINEAR QUANTUM DOT CLUSTERS.

AUTHOR: Lucas Rueda Rodríguez, Science Faculty, School of Physics, Physics. Willian Gutiérrez Niño, Doctorate in Natural Sciences - Physics. Ilia Davidovich Mikhailov, Doctorate in Physics.

KEY WORDS: Laterally coupled quantum dots, ordered quantum dot clusters, energy spectrum of an electron and donor, non-linear Stark effect, non-linear Stark effect.

DESCRIPTION: In this thesis the consequences of applying a small electric field to a linear cluster of circular quantum dots using a computational method based on Fourier series is studied. The energies, dipole moments and polarizabilities are analyzed for three different systems characterized by the radius of the central quantum dot compared to the others, showing the non-linear Stark effect and the effects of changing the morphology of the system for the critical value of the electric field. The effects of adding a donor impurity to the central quantum dot are also analyzed, observing the increase in the confinement potential that forces a stronger field to be able to observe the non-linear Stark effect, showing a way to detect impurities in this type of cluster.

1. INTRODUCCIÓN

Cada año se buscan computadoras más poderosas que las del año anterior. En este deseo de incrementar el poder computacional es más apremiante la necesidad de construir dispositivos optoelectrónicos con dimensiones cada vez más pequeñas. Sin embargo, hay un límite al tamaño de estos dispositivos: al ser comparable a la longitud de onda de de Broglie de los electrones, los efectos cuánticos como el efecto túnel, la superposición y el entrelazamiento se hacen presentes, generando efectos indeseados como el tunelamiento de electrones fuera de los dispositivos.

Una solución a este aparente problema, que ha suscitado gran interés en las últimas décadas, es la computación cuántica: en vez de luchar para evitar los efectos cuánticos, se aprovechan. Mediante la superposición de estados y el entrelazamiento cuántico es posible hacer cálculos simultáneos, donde un cambio a un bit altera inmediatamente a otro sin conexión material, permitiendo hacer cálculos paralelos mucho más rápidos. Gracias al manejo de estos conceptos, las computadoras cuánticas tienen la ventaja a la hora de hacer cálculos de optimización, álgebra lineal, factorización y al solucionar ecuaciones diferenciales y, ayudando a resolver problemas en una amplia gama de campos a mucha mayor velocidad, incluyendo el cálculo de simulaciones, la criptografía, *machine learning*, entre otros [1].

La computación cuántica se empezó a estudiar desde la década de los años 80, mas hoy en día su mayor problema sigue siendo la decoherencia: la computación cuántica requiere manipular muchos sistemas cuánticos entrelazados, tan delicados que sus estados pueden alterarse por interacciones débiles con el ambiente [2]. Aún existen muchas incógnitas sobre cómo fabricar los qubits (bits cuánticos), más una de las propuestas, basada en el estado sólido, ha demostrado tener éxito experimental: los llamados átomos artificiales, puntos cuánticos o, en inglés, quantum dots.

Cuando un electrón está confinado en una dimensión, a dicha estructura se le conoce como un pozo cuántico (QW). Cuando se ha restringido el movimiento de los electrones en dos de sus dimensiones, entonces se habla de un hilo cuántico (QWW), y cuando se ha reducido en las tres dimensiones, se tiene un punto cuántico (QD). En la década de los años 80, se desarrollaron nuevas técnicas de fabricación de películas delgadas semiconductoras con grosores de escala nanométrica que permitieron el crecimiento de QDs autoensamblados sobre sus superficies debido a la tensión que aparece en el proceso de crecimiento entre las aleaciones semiconductoras del sustrato y del depósito [3–7]. Los QDs que se forman en este proceso son pequeñas islas de un semiconductor de dimensiones nanométricas, ubicadas sobre la superficie del depósito con un material semiconductor de compuestos diferentes del sustrato.

Hoy en día, en la literatura científica, se discute una amplia gama de aplicaciones para estos semiconductores a escala nanométrica: en fotónica, energía fotovoltaica, computación cuántica, biomedicina y otros campos. A esta escala, la barrera de potencial en las junturas se puede utilizar para el confinamiento cuántico de electrones e impurezas dentro de un pozo de potencial. Las propiedades ópticas de estos sistemas pueden variar según su morfología, dimensión y composición, y además pueden sintonizarse por la aplicación de campos externos (Efectos Stark y Zeeman). Estos sistemas exhiben cambios interesantes en las propiedades ópticas no lineales.

Variando las condiciones del proceso de fabricación se puede disminuir o aumentar la concentración de QDs. Cuando la concentración de QDs se hace suficientemente alta, los QDs pueden agruparse y formar clústeres en una configuración ordenada o desordenada. La separación promedio que existe entre los QDs que conforman un clúster, al igual que se hace con los cristales, puede caracterizarse por el llamado factor de empaquetamiento, mientras que los clústeres en sí mismos pueden considerarse como moléculas artificiales. Cuando este factor es muy pequeño, el efecto de campos externos se reduce al cambio

de las propiedades de cada uno de los QDs por separado. El análisis de efectos de Stark y de Zeeman en QDs solitarios han sido ampliamente estudiados en las pasadas dos décadas (por ejemplo, 5 tesis doctorales de los egresados del grupo FICOMACO). En cambio, cuando el factor de empaquetamiento se incrementa y se acerca a 1 tiene lugar la deslocalización de los portadores de carga atrapados en los QDs, la cual puede generar la polarización o magnetización gigante de un clúster [8, 9].

En este trabajo de investigación se propone el estudio teórico de las propiedades espectrales de electrones e impurezas donadoras confinadas en clústeres lineales de puntos cuánticos, considerando diferentes condiciones de confinamiento cuántico: de tipo estructural y por la aplicación de un campo eléctrico externo. Con este fin, en el proyecto se propone aplicar un nuevo algoritmo basado en series de Fourier, elaborado especialmente para aplicarlo al análisis de clústeres, los cuales pueden estar compuestos tanto por un número grande o pequeño de QDs. El objetivo principal de estos cálculos es analizar la posible relación entre los espectros electrónicos y los parámetros geométricos del clúster de puntos cuánticos – en particular el radio..

Esta tesis fue presentada parcialmente en el IV Congreso Internacional de Ciencias Básicas e Ingeniería de la Universidad de los Llanos y publicada en las memorias del evento [10].

2. OBJETIVOS

2.1. OBJETIVO GENERAL

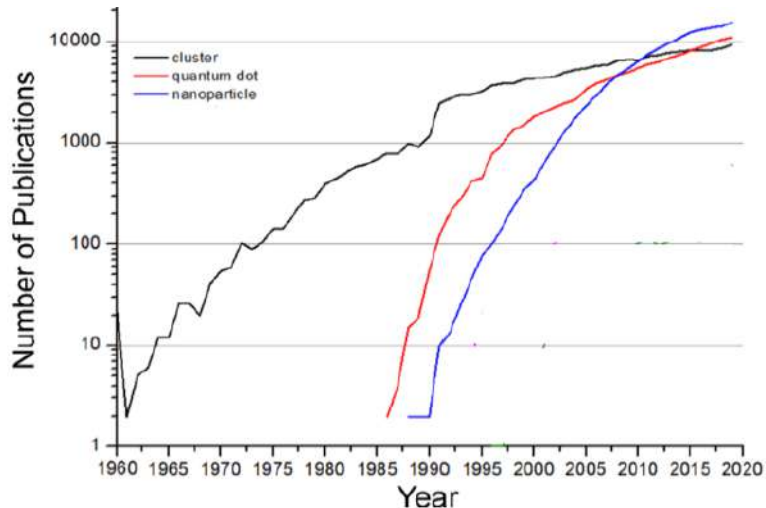
Elaborar un nuevo algoritmo para resolver la ecuación de Schrödinger 2D y aplicarlo al estudio del espectro energético, momento dipolar y polarizabilidad de una donadora confinada en un clúster lineal de QDs, en presencia de un campo eléctrico.

2.2. OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- Elaborar software en Python para resolver la ecuación de Schrödinger 2D para una donadora confinada en un clúster de QDs que presenten simetría axial, los cuales podrán estar localizados de forma arbitraria sobre un plano, en presencia de un campo eléctrico aplicado en el mismo plano.
- Analizar la variación del espectro energético, la densidad de los estados, el momento dipolar, y la polarización en función del campo eléctrico para diferentes disposiciones de la donadora confinada en un clúster de QDs con configuración lineal.
- Estudiar el efecto de introducir desorden en la configuración lineal, relacionado con el rompimiento de la simetría traslacional mediante la no uniformidad en los radios de los QDs.

3. ESTADO DEL ARTE

Figura 1. Número de publicaciones por año.



Una gráfica logarítmica que presenta el número de publicaciones cada año sobre clústeres, puntos cuánticos y nanopartículas. Tomado de la referencia [11].

El efecto Stark, en condiciones para el confinamiento cuántico, es un fenómeno conocido que ocurre cuando se superpone un campo eléctrico a un potencial cuántico. Dos peculiaridades distintas en las propiedades espectrales que introduce un campo eléctrico en estos sistemas han sido reveladas al investigar este fenómeno [3–6].

Primero, el campo eléctrico induce la flexión y la inclinación de la estructura de bandas de energía del material. Esto genera un impacto directo en la disminución de la energía de los electrones, lo que resulta en un desplazamiento rojo (desplazamiento Stark). Segundo, el campo eléctrico externo aumenta la separación entre cargas negativas y positivas (electrón excesivo e ion en el caso de la donadora). Esto conduce a un crecimiento de la energía de las donadoras y los excitones debido a sus polarizaciones y por lo tanto en nanoestructuras semiconductoras el efecto Stark se hace no lineal [7]. El estudio del efecto del campo eléctrico externo sobre el espectro electrónico de nanoestructuras semiconductoras proporciona información sobre la capacidad de controlar sus propiedades

opto-electrónicas. Esto ha impulsado a una gran cantidad de investigadores a analizar estas propiedades, particularmente el impacto que tiene el campo eléctrico sobre las propiedades electrónicas de QDs [12, 13].

La presencia de campos eléctricos y magnéticos introduce un confinamiento adicional a los portadores de carga que se superpone al confinamiento producido por la variación del grosor de la película del semiconductor. El campo eléctrico induce una distribución asimétrica a la densidad de electrones que puede modificar esencialmente las propiedades electrónicas y ópticas en las nanoestructuras de semiconductores. Por lo tanto, investigar los efectos de los campos eléctricos y magnéticos en la energía en semiconductores nanoestructuras ha sido de gran interés y ha atraído una atención considerable en los últimos años [14–16]. En la figura 1 se presenta un gráfico en el que se aprecia el vertiginoso aumento en el número de investigaciones experimentales y teóricas sobre QDs y QDCs, lo que muestra el creciente interés por estudiar las propiedades físicas de estos sistemas y sus posibles aplicaciones en computación cuántica, optoelectrónica y microelectrónica. Así, recientemente, los efectos de los campos eléctricos y magnéticos externos sobre el espectro de energía de los anillos cuánticos con estructuras de bandas anisotrópicas se investigaron en el marco del modelo de masa efectiva [17] y el modelo de Kane [18]. Se espera que efectos similares puedan presentarse en QDCs, pero este problema hasta el momento no ha sido investigado.

Se han estudiado clústeres de puntos cuánticos acoplados, en particular, clústeres de dos puntos cuánticos - cuyas propiedades son diferentes a las de un solo QD gracias al acoplamiento - resolviendo las diferentes especies de biexcitones [19] y bajo efectos de un campo magnético [20]. Además, se ha estudiado los efectos de campos eléctricos y magnéticos en un clúster compuesto de 3 QDs bajo diferentes modelos estructurales (lineales y triangulares) [21]. También se ha estudiado el acoplamiento (y localización) entre pocos puntos cuánticos cilíndricos [22] y el efecto de impurezas/excitones en solo

un punto cuántico cilíndrico [23]. Así, no existen muchas referencias sobre el estudio de impurezas en clústeres de puntos cuánticos con un número alto de QDs.

Diferentes técnicas computacionales, tales como diferencias finitas [24], elementos finitos [25] y los métodos de expansión de series de Fourier [26] se han implementado recientemente para solucionar modelos de películas semiconductoras delgadas con 1, 2 y hasta 4 QDs para calcular su espectro energético, las intensidades de las líneas espectrales la polarizabilidad eléctrica, la permeabilidad magnética, etc. Sin embargo, estos métodos no permiten rectificar algunos detalles del mecanismo oculto en la formación de funciones de onda de clústeres con grandes números de QDs. Estos son esenciales para entender sus propiedades colectivas similarmente al caso de sistemas atómicos con potenciales centrales, en los cuales los estados energéticos se clasifican por sus momentos angulares. La falta de simetría central en un QDC conduce a un entrelazamiento de estados con diferentes momentos angulares y la no separabilidad de sus funciones de onda.

De esta forma, se puede ver que el estudio de clústeres de puntos cuánticos resulta ser un campo de mucho interés en la actualidad, donde aún se presentan muchas incógnitas sin explorar: el efecto de impurezas en un QDC con números mayores de puntos cuánticos bajo un campo eléctrico. De ahí nuestra motivación para estudiar estos fenómenos de forma computacional: el método de estos artículos se puede extender al estudio del efecto Stark en un clúster lineal de QDs para un número de QDs arbitrario.

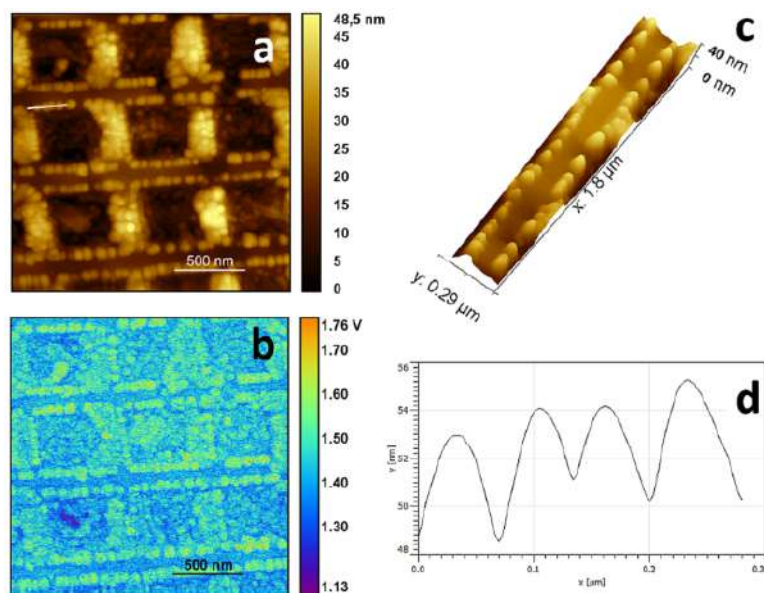
4. MARCO TEÓRICO

4.1. Puntos Cuánticos

Los clústeres de puntos cuánticos (QDCs) o moléculas de puntos cuánticos (QDMs) son estructuras fabricadas artificialmente que aparecen como agrupaciones de puntos cuánticos sobre la superficie de películas semiconductoras de grosor nanométrico. En las últimas dos décadas estos materiales han atraído la atención de muchos investigadores debido a sus propiedades prometedoras en tecnologías de información cuántica. Los QDCs se han utilizado para implementar qubits cuánticos, compuertas cuánticas, memorias de espín de excitón, celdas solares, diodos emisores de luz, etc. [27] La posibilidad de manipular el confinamiento cuántico en QDMs, mediante el control de los parámetros geométricos y estereoquímicos de las heteroestructuras, abre una amplia gama de nuevas posibilidades respecto a sus propiedades optoelectrónicas en comparación con las moléculas naturales, cuyas propiedades se controlan únicamente por el potencial de Coulomb.

Uno de los procesos predilectos para la creación de QDs y QDCs es conocido como autoensamblado: una técnica basada en el modo de crecimiento Stransky-Krastanov. En esta técnica, los QDs se forman en una película conocida como “capa húmeda”, la cual tiene un grosor muy pequeño que confina a los átomos a un movimiento bidimensional, que existe sobre una capa de sustrato. Los esfuerzos que se generan debido a las diferencias entre los parámetros de la red cristalina deforman el sustrato y acumulan energía elástica, hasta llegar al llamado espesor crítico donde esta energía se libera formando nanoislas: puntos cuánticos [28]. En la figura 2 se puede observar una imagen experimental de una nanoestructura de QDs creados con este método. Es importante notar que no todos los puntos tienen el mismo radio, altura y no tienen separaciones perfectamente uniformes – cada punto es distinto.

Figura 2. Imágenes de una nanoestructura lineal de QDs generados por el proceso de autoensamblado



(A) Topografía AFM (B) Imagen tomada por un microscopio KFM de la nanoestructura de QDs de InAs (C) Detalles de la formación lineal de los QDs de InAs (D) Sección transversal de una cadena de puntos. Tomado de la referencia [29].

Cambiando las condiciones de fabricación de los QDs, se puede controlar y variar los espectros de absorción y radiación de las películas delgadas semiconductoras que presentan QDCs. Las posiciones y formas de las líneas espectrales se pueden ajustar con una alta precisión mediante dos factores; en primer lugar, la morfología, la estereoquímica y las dimensiones de los QDs individuales y, en segundo lugar, la configuración geométrica del QDC con factores como la separación o diferencia de tamaños entre QDs.

El espectro electrónico de los QDCs puede modificarse, adicionalmente, en presencia de campos externos eléctricos y magnéticos. Un campo eléctrico externo aplicado, por ejemplo, a lo largo de un QDC con una configuración lineal puede polarizarlo y producir un cambio brusco en las posiciones de las líneas espectrales revelando un efecto Stark no lineal [30]. Por otro lado, un campo magnético aplicado a un QDC con una configuración cíclica puede generar corrientes circulares de túnel, las cuales se manifiestan en el es-

pectro electrónico en una serie de cambios en el espectro electrónico llamados efecto Aharonov-Bohm [31].

4.2. Aplicaciones

Las películas delgadas semiconductoras con grosores de micrometros y nanómetros son la base de la micro-, nano- y optoelectrónica. A diferencia de un “semiconductor en bloque”, donde los parámetros del material (la esteoquímica, la constante de red, la constante dieléctrica y magnética, la brecha entre las bandas de conducción y de valencia, la masa efectiva del electrón, etc.) permanecen invariables dentro de todo el material, en las “nanoestructuras semiconductoras” estos permanecen constantes solo dentro de regiones de escala nanométrica. En consecuencia, el movimiento de los portadores de carga en estos materiales queda restringido dentro de unas regiones cuyos tamaños son comparables a las longitudes de onda de De Broglie. Este efecto se conoce como confinamiento cuántico [32].

Las nanoestructuras semiconductoras que presentan mayor interés debido a sus aplicaciones son los QDs. En los QDs el movimiento del electrón está confinado en las tres direcciones espaciales, resultando un espectro energético discreto donde los QDs emiten luz con una longitud de onda específica. Entre más pequeño sea el tamaño del QD, menor es la longitud de onda emitida. Estas nanoestructuras crecen mediante la técnica de autoensamblaje, la cual ofrece diferentes modos, determinados por las condiciones en las que dicho crecimiento se realiza (temperatura del sustrato, velocidad de deposición de materiales, etc.) y de los desajustes de las propiedades de los materiales (constantes de red, constantes elásticas, etc.).

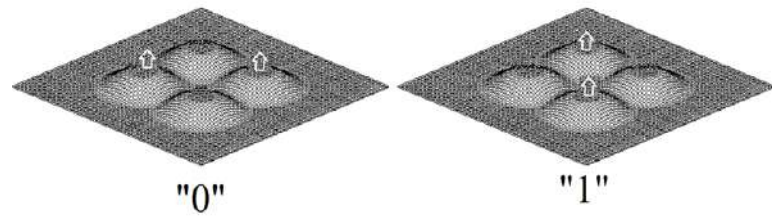
El tamaño y la forma de los QDs pueden ser modificados por medio de varios factores, entre ellos: el desajuste en las constantes de red, la temperatura, la velocidad de crecimiento,

entre otras. Esto permite construir QDs con diferentes formas: pirámides, lentes, volcanes o anillos cuánticos [32]. Estas estructuras son observadas experimentalmente, debido a que la formación de los QDs en autoensamblaje se realiza de manera instantánea a lo largo y ancho del semiconductor sustrato. Estudios teóricos de dos QDs acoplados horizontalmente muestran que el rompimiento de la simetría rotacional afecta notablemente el espectro energético y sus propiedades ópticas y eléctricas [33, 34] El análisis teórico del efecto del acoplamiento en un clúster con 3 QDs sobre el entrelazamiento del spin y el efecto Kondo fue realizado en la publicación [35].

Una de las áreas más interesantes con posibilidad de aplicaciones de QDCs es la computación cuántica basada en un estado altamente entrelazado. Este se refiere a la capacidad de los qubits de estar íntimamente relacionados entre sí, de modo que el cambio en uno de ellos afecta instantáneamente a los demás incluso si se encuentran separados por grandes distancias. El entrelazamiento cuántico permite realizar cálculos paralelos y resolver problemas complejos de manera eficiente, abriendo nuevas posibilidades en áreas como la criptografía y la simulación de sistemas físicos complejos. Esta es una de las arquitecturas cuánticas conocidas con mayor tolerancia a fallas y más tolerante a las posibles pérdidas de qubits, lo cual es de gran importancia para las arquitecturas ópticas [36]. Una posible configuración de QDCs que puede usarse en computación cuántica como un qubit fue propuesta en la publicación [37], la cual consiste de cuatro puntos cuánticos acoplados (QQDs, "Quadra-Quantum Dots"). Cuando estos se cargan por dos electrones confinados, la fuerza de repulsión entre ellos hace que en el estado base haya dos estados degenerados tripletes presentados en la figura 3 que pueden interpretarse como dos dígitos binarios: "0" o "1".

De manera similar, un clúster compuesto por 8 sistemas cuádruples similares, es decir, compuesto por 32 QDs, puede considerarse como 8 bits adyacentes que pueden almacenar 1 byte de información correspondiente a $2^8 = 256$ bits y jugar el papel como una celda

Figura 3. Ejemplo de qubit de 4 QDs.



Un ejemplo de un clúster formado por 4 QDs, el cual cargado por un par de electrones puede jugar un papel de un qubit.

de 1 byte.

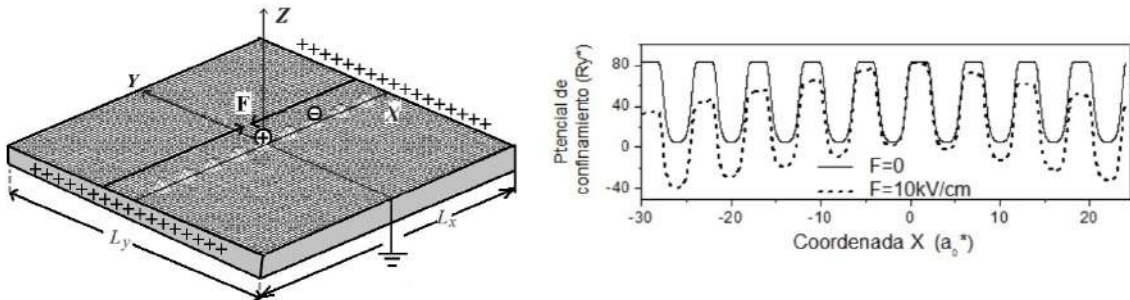
5. MODELO MATEMÁTICO

En este trabajo se desarrolló un método basado en series de Fourier que permite encontrar numéricamente las energías y las funciones de onda de una partícula confinada en un clúster lineal de QDs – pues los parámetros que describen las propiedades espectrales de QDCs se expresan, en la aproximación adiabática, en términos de la solución de la ecuación de Schrödinger 2D [38].

5.1. Modelo básico del sistema

En la figura 4(a) se muestra un modelo donde $2N + 1$ puntos cuánticos idénticos y axialmente simétricos, de radio R , en una disposición lineal con separación entre los centros de los QDs $a > 2R$, los cuales están depositados sobre una delgada capa húmeda de dimensiones $L_x \times L_y$ y de espesor h_{min} . Se propone que el espesor de la nanocapa en la cima de QDs es igual h_{max} y por ende la altura de los QDs es igual a $h_{max} - h_{min}$. Para analizar el efecto Stark, se aplica un campo eléctrico a lo largo del eje X , con un potencial positivo en los cortes verticales de $-L_x/2$ y $L_x/2$ conectando a tierra el corte vertical $Y = 0$.

Figura 4. Imagen del modelo y el potencial aplicado



(a) Modelo con una impureza confinada en el centro de un QDC lineal. (b) Perfil transversal del potencial aplicado a la nanoestructura.

El análisis del desplazamiento de los niveles energéticos del clúster en función del campo eléctrico sirve como una herramienta eficiente para estudiar la estructura de los QDCs y establecer sus características importantes tales como el factor de empaquetamiento, la homogeneidad, el tamaños de los QDs, la presencia de impurezas de n- y p-tipos, la presencia de excitones, etc. El modelo del campo eléctrico particular presentado en la figura 4(b) fue escogido en este trabajo por la comodidad al aplicar del método de Fourier: el potencial de confinamiento será entonces una función par. Este método basado en series de Fourier posteriormente puede extenderse a QDCs más complejos y campos no simétricos.

Para esta configuración lineal, se define la altura h de los puntos cuánticos idénticos como en la ecuación 1.

$$h(x, y) = h_{min} + \sum_{k=1}^N z(\sqrt{(x - x_k)^2 + y^2}); \quad (1)$$

$$z(\rho) = \begin{cases} (h_{max} - h_{min})(1 - \frac{\rho^2}{R^2}); & \rho \leq R, \\ 0; & \rho > R. \end{cases} \quad (2)$$

Donde los parámetros x_k corresponden a la coordenada x del centro geométrico de cada uno de los puntos cuánticos, R corresponde al valor del radio del QD en su base, y h_{max} es la altura máxima del QD, correspondiente a su centro. Para el caso de QDs equidistantes, como los de la figura 4(a), la expresión que define las posiciones de los centros de los QDs es $x_k = a \cdot k, k = [-N, N]$, donde N es el número de puntos cuánticos a cada lado del punto central y a corresponde a la separación entre los centros de las bases de QDs adyacentes. El tamaño del modelo se toma $L_x = L_y = 2Na + 2R + 6$. $2Na$ corresponde al tamaño desde x_{-N} a x_N , $2R$ para tomar el cuenta el radio de los puntos cuánticos centrados en los extremos, y 6 para aumentar el tamaño del clúster y así amortiguar efectos en los bordes que surgen al calcular una aproximación con series de Fourier.

5.2. Definición del Hamiltoniano

A continuación, se presentan los resultados de los cálculos en el espectro de un electrón libre y un electrón enlazado con una donadora, confinados en una nanocapa cuadrada de GaAs con dimensiones $L_x \times L_y$ con un clúster de QDs acoplados lateralmente sobre ella, sumergidos en un entorno de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, de acuerdo con el modelo presentado en la figura 4. Para este modelo, se utilizan los parámetros del material pertinentes a GaAs y $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$, (la masa efectiva de electrón $m^* = 0.067m_e$ y constante dieléctrica $\epsilon = 12.5$ de GaAs) tomados de la referencia [8]. Con estos parámetros, comúnmente se utilizan las unidades adimensionales, para la distancia, el radio efectivo de Bohr $a_o^* = 4\pi\epsilon_0\epsilon\frac{\hbar^2}{m^*e^2} \approx 10nm$, y, para la energía, el Rydberg efectivo es $Ry^* = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\epsilon a_o^*} \approx 6meV$.

Según la referencia [8], la ecuación de Schrödinger para la ecuación de onda $\Psi(x, y, \gamma)$ con el campo eléctrico F aplicado a lo largo del eje X, en la aproximación adiabática, tiene la siguiente forma:

$$[-\Delta_{x,y} + V(x, y, \gamma)]\Psi(x, y) = E(\gamma)\Psi(x, y); \quad (3)$$

$$V(x, y, \gamma) = V_{conf}(x, y) - \alpha F|x| + \gamma V_{eD}(x, y); \quad (4)$$

$$-L_x/2 < x < L_x/2, -L_y/2 < y < L_y/2; \quad (5)$$

$$\Psi(-L_x/2, y) = \Psi(L_x/2, y) = \Psi(x, -L_y/2) = \Psi(x, L_y/2) = 0. \quad (6)$$

Examinando cada parte de forma individual, los potenciales de confinamiento para el electrón $V_{conf}(x, y)$ están relacionados con el grosor de la nanocapa, dada en la aproximación adiabática para la estructura de GaAs/ $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ en unidades adimensionales por la siguiente función de ajuste (tomada de la referencia [8]).

$$V_{conf}(x, y) = \frac{5}{h^2(x, y) + 0.05}. \quad (7)$$

Para calcular el potencial de confinamiento estructural de un clúster de QDs depositado sobre una película de un semiconductor, se utilizó el modelo “muffin tin” (molde de panqué), para lo cual el potencial se considera igual a cero fuera de los QDs y a un potencial parametrizado dentro los QDs, calculado a partir de la Aproximación Adiabática (ecuación 7), relacionándolo con la morfología de cada QD según la ecuación 8.

$$V_{ad}(x, y) = \frac{5}{h^2(x, y) + 0.05} - \frac{5}{h_{min}^2 + 0.05} \quad (8)$$

El segundo término del potencial en la ecuación 4 define el aporte a la energía del electrón en Ry^* contribuida por el campo eléctrico externo F . Si el campo está dado en kV/cm el coeficiente $\alpha = 0.17$. Se toma el valor absoluto de x para hacer esta parte del potencial par, que tendría la forma vista en la figura 4.

Para el potencial de atracción impureza donadora-electrón $V_{eh}(x, y)$, al ser una capa casi-bidimensional, esta puede aproximarse, según la referencia [39], con la fórmula de Rytova-Keldysh, la cual es equivalente al potencial de coulomb a grandes distancias.

$$V_{eD}(x, y) \approx -\frac{2\epsilon}{r_0} \ln \left(1 + \frac{r_0}{\epsilon \sqrt{x^2 + y^2}} \right), \quad (9)$$

Donde la constante dieléctrica $\epsilon = 12.5$ para el GaAs, que tiene un radio de apantallamiento $r_0 = 0.1 a_0^*$. Se observa que, al igual que el potencial de confinamiento, el potencial de atracción es una función par.

Las condiciones de frontera en la ecuación 6 tienen en cuenta que a los extremos de nanocapa en contacto con el aire la barrera de potencial es muy alta y la probabilidad del escape del electrón es nula, haciendo que la función se vuelva nula.

La energía del electrón depende de γ , que en el caso $\gamma = 0$, se tiene que E corresponde a la energía del electrón libre y, en el caso donde $\gamma = 1$, define la energía del electrón

enlazado con la donadora localizada en el centro del clúster.

Con la energía, es posible hallar el momento dipolar p_k y la polarizabilidad χ_k con respecto a la intensidad del campo eléctrico F , las cuales se definen de acuerdo al teorema de Hellman-Feynman en la ecuación 10 y 11.

$$p_k = -ea_0 \frac{\partial E_k(F)}{\partial F}, \quad (10)$$

$$\chi_k = \frac{\partial p_k(F)}{\partial F} = -ea_0 \frac{\partial^2 E_k(F)}{\partial F^2}. \quad (11)$$

5.3. Método de expansión de series de Fourier

Una vez están determinados todos elementos del problema de contorno es necesario escoger un método para su solución entre uno de elementos finitos o algún método variacional. Ambas técnicas permiten reducir el problema a la búsqueda de valores y vectores propios en una matriz definida por medio de una ecuación secular.

En el método de elementos finitos las funciones base son locales y, por ende, crecen rápidamente al aumentar el número de QDs en un clúster, aumentando la dimensión de la matriz secular rápidamente.

En cambio, en los métodos variacionales como el método de expansión en series de Fourier que se utiliza en este trabajo, las funciones de onda son globales, lo que brinda una oportunidad de disminuir esencialmente la dimensión de la matriz secular para lograr la misma precisión en comparación con otros métodos.

Como el potencial de confinamiento es una función par, se busca la solución del problema usando la forma de serie doble de Fourier

$$\Phi(x, y) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^N c_{n,m} \varphi_{nm}(x, y); \quad (12)$$

Aquí, $\varphi_{nm}(x, y)$ son la base ortogonal de las funciones base en el subespacio de Hilbert. En este trabajo, se usarán las funciones normalizadas (demostración en el apéndice A):

$$\varphi_{nm}(x, y) = \varphi_n(x)\varphi_m(y), \quad (13)$$

$$\varphi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{L_x}} e^{i\frac{2\pi n}{L_x}x}, \varphi_m(y) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{i\frac{2\pi m}{L_y}y}. \quad (14)$$

Para encontrar una solución de la ecuación 3, de acuerdo con el método de Galerkin, se puede minimizar la discrepancia $D(x, y) = \langle \Psi(x, y) | \hat{H} - E | \Psi(x, y) \rangle$, obteniendo la ecuación secular

$$\sum_{n'=1}^{N_x} \sum_{m'=1}^{N_y} \left[\hat{H}_{nm, n'm'} - E_D(x_h, y_h) \delta_{nn'} \delta_{mm'} \right] c_{n'm'} = 0; \quad (15)$$

$$\hat{H}_{nm, n'm'} = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \varphi_{nm}^*(x, y) \hat{H} \varphi_{n'm'}(x, y) dy. \quad (16)$$

Expandiendo la expresión anterior para obtener los elementos matriciales (apéndice B), se obtiene

$$\hat{H}_{nm, n'm'} = 4\pi^2 \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{m^2}{L_y^2} \right) \delta_{nn'} \delta_{mm'} + \bar{V}_{n-n', m-m'}, \quad (17)$$

$$\bar{V}_{k,p} = \frac{1}{L_x L_y} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \cos \frac{kx}{L} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} V(x, y) \cos \frac{py}{L} dy. \quad (18)$$

La ecuación 18 corresponde a los coeficientes de Fourier coseno-coseno del potencial. Teniendo en cuenta que el coseno es una función par, los elementos $\bar{V}_{n-n', m-m'}$ pueden ser escritos como $\bar{V}_{|n-n'|, |m-m'|}$. Para hallar el valor de los coeficientes de la serie de Fourier se usó la transformada de Fourier (apéndice C), por lo que

$$\bar{V}_{k,p} = \frac{1}{L_x L_y} F\left(\frac{2\pi k}{L_x}, \frac{2\pi p}{L_y}\right). \quad (19)$$

Donde $F(w_x, w_y)$ es la parte real de la transformada de Fourier del potencial. El beneficio

de usar este método en lugar de otros como el método de Filon es la extensa cantidad de algoritmos eficientes para su cálculo. En este trabajo, se usó la transformada de Fourier rápida (FFT) para calcular los coeficientes sobre la malla $N_x = N_y = 40$. Como es suficiente realizar este cálculo solo para los índices positivos, el número total de coeficientes de Fourier para calcular es igual a $(N_x + 1)(N_y + 1)$, mientras que la dimensión de la ecuación secular es $(2N_x + 1)(2N_y + 1)$.

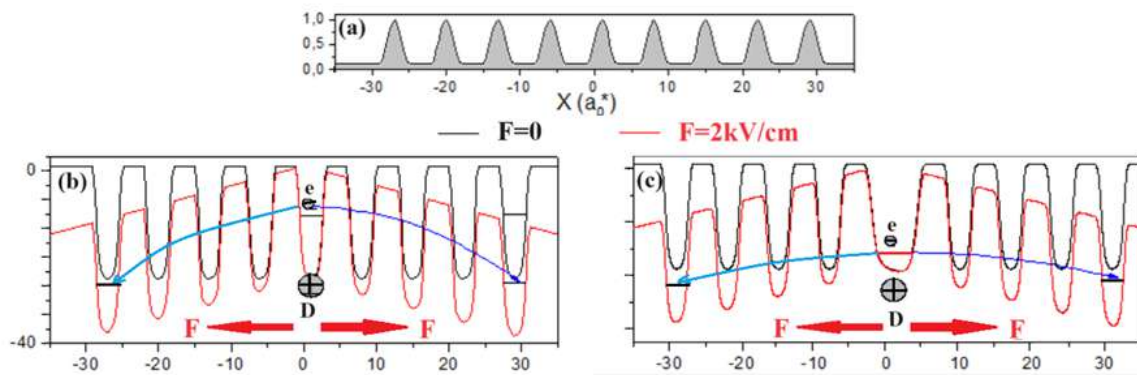
Una vez se obtiene la matriz $\hat{H}_{nm, n'm'}$, obtener las energías se convierte en resolver un problema de valores propios. Para hacer esto, se usó la librería de python *numpy*, con el submódulo *linalg* (álgebra lineal) para hacer uso de la función *numpy.linalg.eig*, que halla los valores propios de una matriz cuadrada.

6. EXPERIMENTOS Y RESULTADOS

A continuación, se presenta el análisis del efecto Stark sobre el espectro energético, el momento dipolar, la polarizabilidad y el desplazamiento de la línea principal en el espectro de absorción de un electrón confinado a un QDC lineal. Se hace el análisis para un electrón libre y para un electrón ligado a una impureza donadora colocada en el QD central del clúster, para el cual además se calculará la energía de enlace (la ionización de la donadora desde el estado base). Este análisis permitirá definir experimentalmente si en un clúster se presenta una impureza donadora.

Otra aplicación para nuestros cálculos se relaciona con la posibilidad de establecer la estructura particular de un clúster utilizando las mediciones espectrales del efecto Stark. Con este fin, en la siguiente sección se analizará la influencia de la morfología de un clúster sobre las propiedades espectrales en presencia de un campo eléctrico, particularmente por cambios de tamaños de algunos QDs.

Figura 5. Secciones transversales de un clúster lineal y su potencial.



Las secciones transversales de (a) perfil del clúster, (b) potencial de confinamiento para modelo con idénticos QDs y (c) para modelo con QD central de radio mayor

El primer paso para establecer esta relación es la elaboración de una herramienta computacional que permita analizar la dependencia de las propiedades espectrales de un clúster

con QDs de diferentes tamaños en función a un campo eléctrico externo. Con el fin de demostrar la eficiencia del software elaborado, se mostrarán los resultados de los cálculos obtenidos para el modelo de clúster presentado en la figura 5, en el cual se altera el tamaño del QD central. En la figura 5(a) se muestra la sección transversal de un clúster lineal con 9 QDs idénticos cuyos radios son iguales a $R = 2a_0^*$ con distancia entre puntos $a = 7a_0^*$ y alturas $h = a_0^*$. En la figura 5(b) se muestra la sección transversal del potencial de confinamiento a lo largo de eje X sin campo eléctrico (color negro) y en presencia de campo eléctrico (color rojo). En la figura 5(c) se presenta el potencial para un modelo en el cual el radio del QD central es mayor al de los demás QDs: en este caso, igual a $3a_0^*$.

La aplicación de un campo modifica esencialmente la forma del potencial de confinamiento, haciendo los pozos de potencial en los extremos más profundos en comparación con el pozo central, lo que aumenta la probabilidad de encontrar el electrón en los extremos del clúster en comparación al QD central, aumentando todos los niveles de energía, lo que correspondería a un efecto Stark lineal. Sin embargo, al llegar el valor de campo eléctrico a un umbral (campo crítico) y el electrón salta bruscamente desde el QD central hasta uno de los extremos, su energía cambia bruscamente exhibiendo el efecto Stark no lineal.

Cuando se coloca una donadora en el QD central, debido a la atracción de Coulomb, el electrón se encontrará con mayor posibilidad en la vecindad de la donadora, por lo que para saltar hacia los QDs en los extremos se necesitará un campo eléctrico mayor. Por esto, la posición del punto crítico en la curva de la energía en función de campo externo se desplaza hacia la derecha. Este efecto Stark no lineal puede proporcionar una herramienta experimental para diagnosticar la presencia de una donadora en un clúster.

La otra posibilidad que se estudió para la utilización del efecto Stark no lineal está relacionada con el análisis de la no homogeneidad de un clúster debido a la presencia de QDs de diferentes tamaños. En la figura 5(c) se muestra un ejemplo de un clúster en el cual el tamaño del QD central es mayor al de los otros QDs, provocando que el confinamiento

to en él sea menor y, por esto, la energía en este QD sea más baja. Por esta razón, se necesita un campo eléctrico más alto para inducir a que el electrón salte hacia los QDs de los extremos. Se puede esperar el desplazamiento a la derecha del valor del campo eléctrico crítico en el efecto Stark no lineal, el cual debe estar relacionado directamente con el radio de los QD.

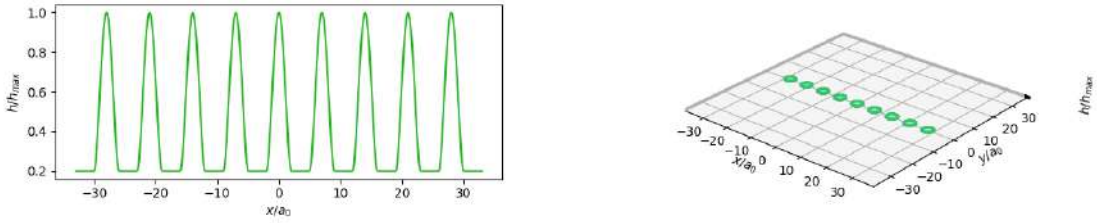
Se presentarán los resultados de las simulaciones computacionales para analizar el efecto Stark en 3 tipos de clústeres: un clúster homogéneo, otro con un QD central de mayor radio y, por último, un clúster con un QD central de menor radio. En todos los casos se presentan las curvas de las energías de los primeros niveles, los momentos dipolares y polarizabilidades del estado base, el espectro de absorción y las energías de enlace del estado base en función del campo eléctrico externo.

6.1. Clúster homogéneo lineal de QDs

Para analizar las propiedades espectrales y eléctricas, se considera una nanocapa de grosor $h_{min} = 0.2a_o^*$ con un clúster de 9 ($2 \times 4 + 1$) QDs: todos con radio $R = 2a_o^*$, altura máxima $h_{max} = 1.0a_o^*$ y separaciones entre sus centros de $a = 7a_o^*$ (Gráfica 6). Inicialmente, se analiza la solución de la ecuación de Schrödinger (ecuación 3) para un electrón libre ($\gamma = 0$) y posteriormente para un electrón ligado a una impureza donadora ($\gamma = 1$) confinados en la heteroestructura.

En estos cálculos, al igual que en todos los posteriores, se utiliza el método de doble series de Fourier, en el cual el número de los coeficientes tomados a lo largo de los ejes X y Y es $N_x = N_y = 40$. El número de valores propios que proporciona el método al resolver la ecuación secular es $40 \times 40 = 1600$. Sin embargo, solo se presentarán los resultados para los 5 niveles más bajos $E_k = 1, 2, 3, 4, 5$ para facilitar la comprensión y el análisis. Las soluciones de la ecuación secular se realizaron para 20 valores de campo eléctrico externo

Figura 6. Imagen de un QDC de 9 QDs equidistantes y de igual tamaño $R = 2$.



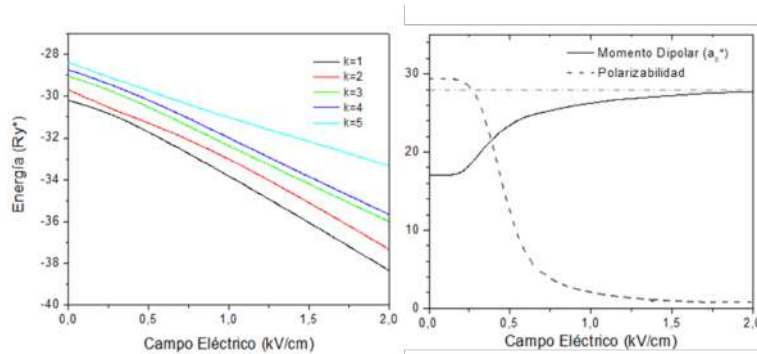
(a) Corte bidimensional en $y = 0$ (izquierda) (b) Imagen tridimensional con escala uno a uno (derecha)

y en base a estos cálculos se construyeron los gráficos de los parámetros espectrales en función del campo eléctrico externo.

6.1.1. Electrón libre

En la figura 7(a) se presentan las energías de los 5 niveles más bajos del electrón confinado en el clúster en función del valor del campo eléctrico F . En la figura 7(b) se observa el momento dipolar inducido y la polarizabilidad (ecuaciones 10 y 11).

Figura 7. Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón libre en el sistema de 9 QDs equidistantes y de igual tamaño $R = 2$.



(a) Gráfica de la energía de los primeros 5 estados contra la intensidad del campo eléctrico (izquierda) (b) Gráfica de momento dipolar y polarizabilidad del primer estado (derecha)

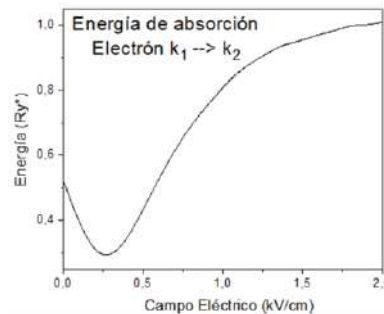
Para asociar los valores energéticos en la figura 7(a) con el modelo, hay que tener en cuenta el piso del potencial de confinamiento de la estructura. Según la ecuación 8, la

energía por debajo de la banda de conducción del material GaAs tiene un valor de, aproximadamente, $-50.8Ry^*$. El confinamiento estructural aumenta esta energía y por esto todos los niveles de energía en la figura 7(a) son superiores a este, pero el campo eléctrico paulatinamente disminuye su valor debido al efecto Stark.

En la figura 7(b) se presentan las curvas del momento dipolar inducido p (la línea sólida), y polarizabilidad α (línea punteada) para el primer estado. Los valores del momento dipolar están dados en las unidades del radio de Bohr efectivo a_0^* y describen la distancia media entre la posición del electrón y el centro del clúster.

Se ve que en ausencia de campo eléctrico esta distancia es mínima y aproximadamente igual a $17a_0^*$ mientras que la polarizabilidad es máxima. Es decir, la función de onda del electrón en el estado base tiene una dispersión muy grande – el electrón se encuentra en cualquiera de los QDs casi con igual probabilidad. A medida que el valor del campo eléctrico se incrementa, el momento dipolar crece, y para $F = 2kV/cm$ llega al valor máximo, mientras que la polarizabilidad se hace igual a cero. Esto significa que, en el caso del electrón, está fuertemente localizado en uno de los QDs en el extremo del clúster.

Figura 8. Energía de absorción para el electrón libre en el estado base para el sistema de 9 QDs equidistantes y de igual tamaño $R = 2$.



Energía de absorción del estado k_2 a k_1 para el electrón libre

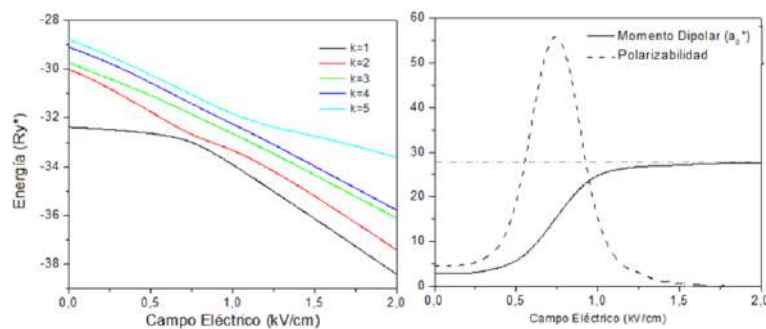
Usando los resultados presentados en la figura 7(a) se pueden calcular las energías necesarias para un fotón en el proceso de absorción, las cuales son iguales a las brechas

energéticas entre dos niveles correspondientes. Se considera, como un ejemplo de un proceso de absorción, a la transición entre los niveles del estado base y el primer nivel excitado ($k_1 \rightarrow k_2$), es decir $E_{1 \rightarrow 2} = E_2 - E_1$ que se logra ver en la figura 8. Se ve que la brecha entre estos 2 niveles varía con el incremento del campo eléctrico y logra su valor mínimo para $F \approx 0.3 \text{ kV/cm}$, coincidiendo con el punto donde se observa el cambio de pendiente en las energías – el efecto Stark no lineal – en la figura 7(a) y con el punto donde el momento dipolar empieza a aumentar y la polarizabilidad a disminuir en la figura 7(b). Este es el punto para el que el electrón tiene mayor facilidad para saltar de un nivel a otro.

6.1.2. Electrón ligado a donadora

En la figura 9(a) se presentan las energías de los 5 niveles más bajos con una donadora ubicada en el QD central del clúster homogéneo en función del valor del campo eléctrico F .

Figura 9. Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón ligado en el sistema de 9 QDs equidistantes y de igual tamaño $R = 2$.



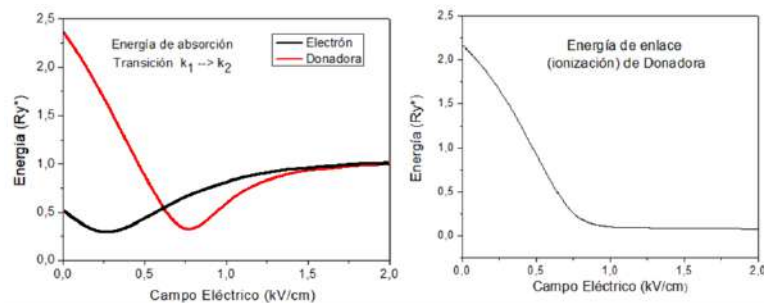
(a) Gráfica de la energía de los primeros 5 estados contra la intensidad del campo eléctrico (izquierda) (b) Gráfica de momento dipolar y polarizabilidad del primer estado (derecha)

Comparando 7(a) y 9(a) se pueden observar dos diferencias esenciales. Primero, las energías de la donadora son más bajas entre 1 y 2 kV/cm comparadas a las del electrón libre.

Esto se debe a la atracción de Coulomb electrón-donadora y al confinamiento adicional relacionado con esta atracción. La segunda diferencia en las curvas espectrales consiste en el comportamiento de las pendientes de las curvas correspondientes. En particular, para la donadora se nota un cambio brusco de la pendiente cuando el campo eléctrico creciente logra el valor $0.75kV/cm$ mientras que para el electrón libre este cambio de pendiente no es tan brusco y ocurre alrededor de $0.3kV/cm$.

Esta hipótesis se confirma con las curvas del momento dipolar (la línea sólida) y la polarizabilidad (línea punteada) para el estado base presentadas en la 9(b). Se puede ver que en ausencia del campo eléctrico esta distancia es mínima y aproximadamente igual a $1a_0^*$, el valor típico para un enlace hidrogenoide mientras que la polarizabilidad tiene un valor en el mismo orden. Es decir, el electrón en ausencia del campo eléctrico está fuertemente ligado a la donadora y localizado dentro del QD central. A medida que el valor del campo eléctrico incrementa, tanto el momento dipolar y la polarizabilidad crecen, hasta llegar a $F = 0.75kV/cm$ donde la polarizabilidad adquiere su valor máximo. Posteriormente, el momento dipolar llega a un valor máximo en $28a_0^*$ y la polarizabilidad a un valor mínimo de cero. Esto significa que el electrón ya está fuertemente localizado en uno de QDs ubicados en el extremo de clúster.

Figura 10. Energía de absorción y de enlace en el estado base para el sistema de 9 QDs equidistantes y de igual tamaño $R = 2$.



(a) Energía de absorción del estado k_1 a k_2 para electrón libre y ligado (b) Energía de enlace de donadora en el estado base, que corresponde a la diferencia entre energías de la figura 7(a) y 9(a)

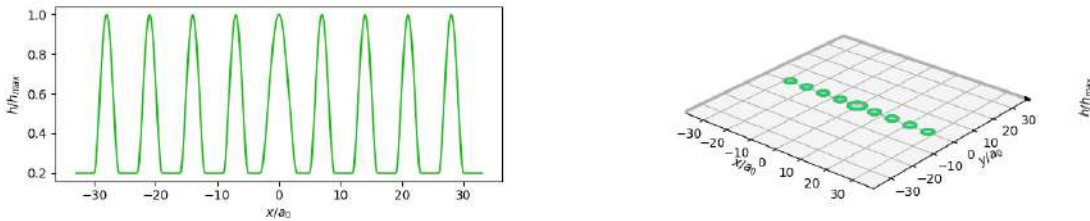
En la figura 10(a) se calculan las energías necesarias de un fotón en el proceso de absorción del nivel k_1 a k_2 . Se observa que la energía varía con el campo aplicado y tiene un mínimo para $F \approx 0.75kV/cm$ – el punto donde la polarizabilidad es máxima y por ende es más fácil inducir un salto entre niveles. Esta gráfica muestra una posibilidad para detectar experimentalmente la presencia de una donadora en un clúster, analizando el desplazamiento de las líneas espectrales de la absorción con el aumento del campo eléctrico externo, pues el punto mínimo aparecerá bajo un campo mayor comparado al electrón libre. Al aplicar un campo lo suficientemente fuerte, sin embargo, ambos sistemas se volverían indistinguibles pues su energía tiende a un mismo valor.

En la figura 10(b) se muestra la energía de enlace (*binding energy*) o ionización para el estado base, que corresponde a la diferencia entre la energía del electrón libre y ligado. Se puede ver que esta energía disminuye a medida que el campo eléctrico crece y es prácticamente igual a 0 para campos eléctricos $F > 0.75kV/cm$, cuando el electrón abandona completamente el QD central, donde se ubica la donadora, y se traslada a uno de los QDs ubicados en un extremo del clúster, por lo que la fuerza de Coulomb entre ambas será despreciable.

6.2. Clúster con QD central de mayor tamaño

Para analizar los efectos de la no uniformidad del tamaño, al sistema de radio homogéneo se la aplicará un cambio: El punto cuántico central, donde se encontrará la impureza donadora, tendrá un radio de $R = 3a_0^*$ como se observa en la figura 11. Las demás propiedades del clúster se mantendrán idénticas al caso anterior.

Figura 11. Imagen de un QDC de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 3$.

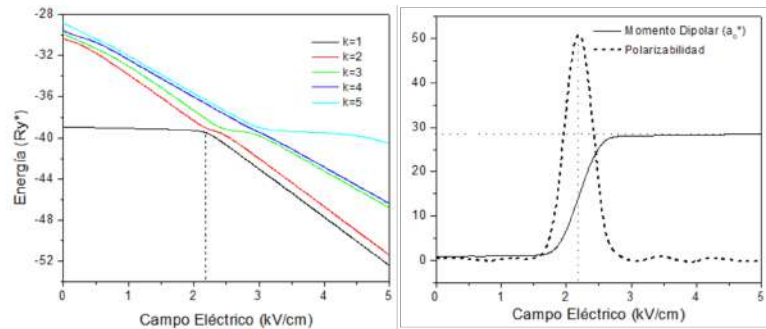


(a) Corte bidimensional en $y = 0$ (izquierda) (b) Imagen tridimensional con escala uno a uno (derecha)

6.2.1. Electrón libre

En la figura 12(a) se presentan las energías de los 5 niveles más bajos para el electrón confinado al clúster en función del valor del campo eléctrico F . En la figura 12(b) se observa el momento dipolar inducido y la polarizabilidad del electrón en el estado base.

Figura 12. Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón libre en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 3$.



(a) Gráfica de la energía de los primeros 5 estados contra la intensidad del campo eléctrico (izquierda) (b) Gráfica de momento dipolar y polarizabilidad del primer estado (derecha)

Se observa un comportamiento similar al del clúster homogéneo (figura 7), donde hay un punto crítico con un cambio de pendiente drástico – el efecto stark no lineal. La principal diferencia entre ambos es bajo qué campo ocurre este cambio: Para el clúster homogéneo (figura 7(a)) es alrededor de $0.3kV/cm$, mientras que para este sistema (figura 12(a)) este ocurre bajo un campo alrededor de $2.2kV/cm$. Esto se corrobora al observar la figura

12(b), donde el máximo de la polarizabilidad se encuentra bajo este valor crítico.

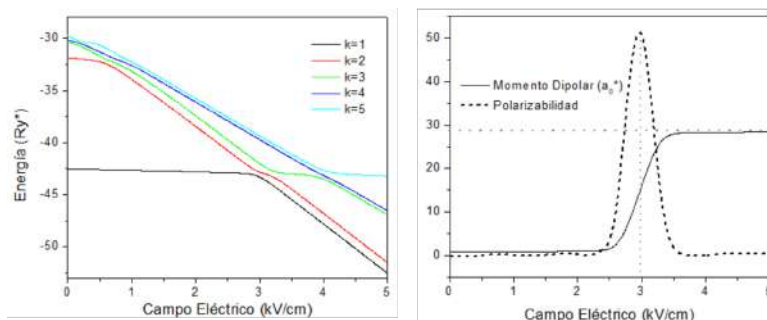
Se observa un comportamiento similar al del clúster homogéneo con una impureza donadora en el punto central: el momento dipolar inicia con un valor cercano a $1a_0^*$ – el esperado para un átomo hidrogenoide – y posteriormente, bajo un campo suficientemente alto (alrededor de $2kV/cm$), empieza a aumentar hasta llegar a un máximo en $28a_0^*$ y se mantiene ahí, lo que significa que el electrón está fuertemente localizado en uno de los QDs del extremo del clúster. La polarizabilidad empieza con un valor de 0, llega a un máximo alrededor de $2.2kV/cm$ y vuelve a anularse una vez el momento dipolar llega a su máximo. Este comportamiento es consistente con lo explicado al inicio de esta sección: al aumentar el radio del punto central la energía dentro de este QD es más baja, por lo que el electrón se encontrará con más probabilidad dentro de este punto y se necesitará un campo eléctrico más alto para inducir al electrón a saltar a un QD más lejano – el punto central de radio mayor confina al electrón como si fuera una carga positiva.

6.2.2. Electrón ligado a donadora

En la figura 13(a) se presentan las energías de los primeros 5 niveles más bajos del electrón ligado a una donadora confinado en el clúster en función del valor del campo eléctrico F . En la figura 13(b) se observa el momento dipolar inducido y la polarizabilidad del electrón.

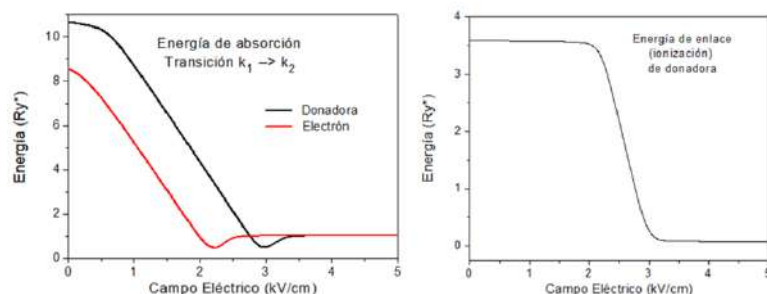
En la figura 13(a) y 13(b) se observa un comportamiento similar al caso del electrón libre: el momento dipolar inicia con un valor de $1a_0^*$ hasta llegar a un campo crítico donde se llega al máximo de $28a_0^*$ después de que la polarizabilidad llega a su punto máximo en $F = 3kV/cm$. Al introducir la donadora, el confinamiento al punto central es mayor, necesitando un campo mayor para inducir un salto del electrón a un punto lejano, que es lo que se observa en esta gráfica.

Figura 13. Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón ligado en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 3$.



(a) Gráfica de la energía de los primeros 5 estados contra la intensidad del campo eléctrico (izquierda) (b) Gráfica de momento dipolar y polarizabilidad del primer estado (derecha)

Figura 14. Energía de absorción y de enlace en el estado base en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 3$.



(a) Energía de absorción del estado k_1 a k_2 para electrón libre y ligado (b) Energía de enlace de donadora en el estado base, que corresponde a la diferencia entre energías de la figura 12(a) y 13(a)

Esta similitud del comportamiento con y sin donadora se corrobora al comparar la energía de absorción en la figura 14(a), donde la forma de la gráfica es idéntica, salvo que la energía de absorción para el electrón ligado tiene un corrimiento hacia la derecha llegando a energías más altas: un corrimiento al azul (*blue shift*).

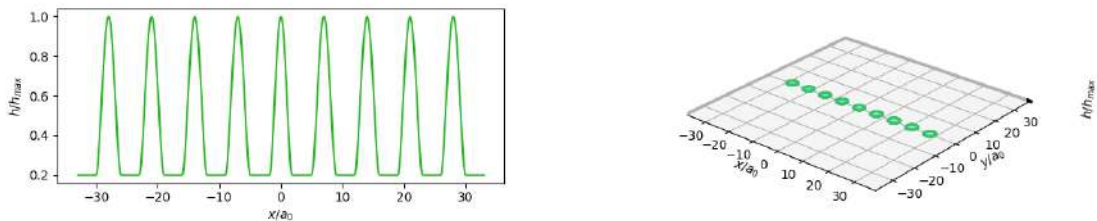
La figura 14(b) muestra cómo la energía de enlace es mayor incluso cuando el campo es nulo comparado al caso de puntos homogéneos (figura 10(b)), mostrando que el confinamiento es mayor en este sistema. No solo esto, sino que la energía permanece constante hasta que un campo lo suficientemente fuerte (alrededor de 2.2 kV/cm) hace que esta

energía disminuya hasta llegar a cero cuando el electrón salta al QD más lejano en lugar de disminuir para cualquier campo aplicado.

6.3. Clúster con QD central de menor tamaño

Finalmente, al sistema de radio homogéneo se la aplicará un cambio: El punto cuántico central tendrá un radio de $R = 1.9a_0^*$ como se observa en la figura 15. Las demás propiedades del clúster se mantendrán idénticas al primer caso.

Figura 15. Imagen de un QDC de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 1.9$.



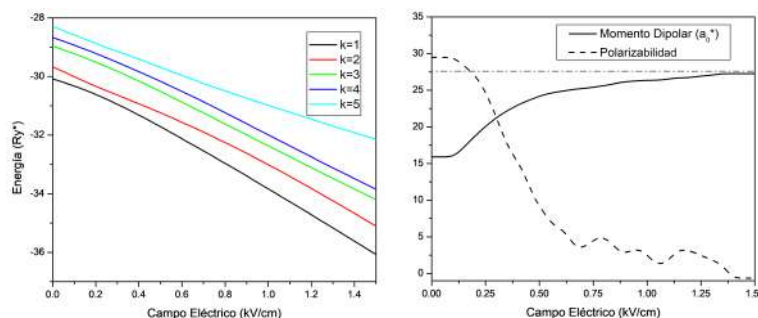
(a) Corte bidimensional en $y = 0$ (izquierda) (b) Imagen tridimensional con escala uno a uno (derecha)

6.3.1. Electrón libre

En la figura 16(a) se presentan las energías de los 5 niveles más bajos para el electrón confinado al clúster en función del valor del campo eléctrico F . En la figura 16(b) se observa el momento dipolar inducido y polarizabilidad del electrón.

En la figura figura 16(a) se observa un comportamiento contrario al del caso anterior: el cambio de pendiente en las energías ocurre bajo un campo menor comparado al sistema homogéneo. Se ve de forma más clara al examinar la polarizabilidad, donde su punto máximo existe hasta $F = 0.2kV/cm$. Esta observación es explicada por el mismo fenómeno bajo el corrimiento en el sistema de mayor radio: Al ser el radio del punto central menor, la

Figura 16. Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón libre en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 1.9$.



(a) Gráfica de la energía de los primeros 5 estados contra la intensidad del campo eléctrico (izquierda) (b) Gráfica de momento dipolar y polarizabilidad del primer estado (derecha)

energía dentro de este QD es más alta, por lo que el electrón tendrá menos probabilidad de encontrarse en este punto y se necesitará un campo menor para inducir al electrón a saltar a un QD más lejano.

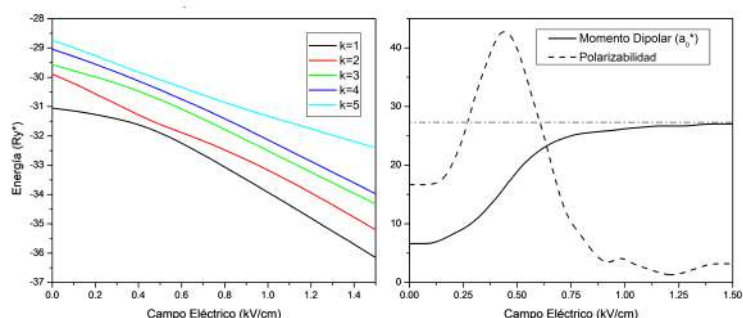
En la figura 16(b), se ve que el momento dipolar bajo campo eléctrico cero tiene un valor alrededor de $17a_0^*$, similar al caso de la figura 7(b), y tiende a un máximo de $28a_0^*$ (al que no llega en este intervalo pues el campo no es suficientemente fuerte). La polarizabilidad llega a un máximo bajo los campos más pequeños ($F = 0.2kV/cm$) y tiende a cero posteriormente.

6.3.2. Electrón ligado a donadora

En la figura 17(a) se presentan las energías de los primeros 5 niveles más bajos del electrón ligado a una donadora confinado en el clúster en función del valor del campo eléctrico F . En la figura 17(b) se observa el momento dipolar inducido y polarizabilidad del electrón.

Al igual que en los casos anteriores, al introducir la impureza se necesita un campo mayor para inducir el efecto Stark no lineal y que el electrón salte a un QD lejano comparado al

Figura 17. Energías, momento dipolar y polarizabilidad del electrón ligado en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 1.9$.



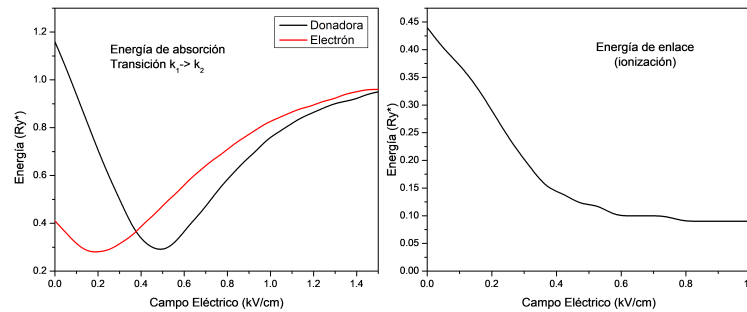
(a) Gráfica de la energía de los primeros 5 estados contra la intensidad del campo eléctrico (izquierda) (b) Gráfica de momento dipolar y polarizabilidad del primer estado (derecha)

sistema sin la impureza, lo cual se comprueba al ver que el punto máximo de la polarizabilidad se ha corrido a $F = 0.45kV/cm$.

Una diferencia importante en la figura 17(b) al compararlo a la figura 9(b) es el valor del momento dipolar bajo campo cero: el momento no es $1a_0^*$. En cambio, tiende a $7a_0^*$, indicando que la atracción de Coulomb a la impureza introducida, aunque sí aumenta las probabilidades de que el electrón se encuentre en el primer punto cuántico, no es lo suficientemente fuerte para contrarrestar los efectos del punto cuántico central con radio menor, por lo que se espera encontrar al electrón, en promedio, más lejos del centro (aproximadamente, en el punto cuántico más cercano al central).

En la figura 18(a) se observa un comportamiento similar a los sistemas anteriores. Hay un corrimiento al azul en la energía de absorción al introducir la donadora – moviendo el campo mínimo a la derecha, mas al aumentar el campo ambas energías tienden a un mismo valor. Para la figura 18(b) se observa que la energía de enlace es considerablemente menor a los sistemas previamente estudiados y tiende a cero bajo campos mucho menores, tal y como se espera al ser el radio del punto central menor, lo que induce a un confinamiento menor.

Figura 18. Energía de absorción y de enlace en el estado base en el sistema de 9 QDs equidistantes con punto central de radio $R = 1.9$.



((a) Energía de absorción del estado k_2 a k_1 para electrón libre y ligado (b) Energía de enlace de donadora en el estado base, que corresponde a la diferencia entre energías de la figura 16(a) y 17(a)

7. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

7.1. CONCLUSIONES

El uso de clústeres de puntos cuánticos semiconductores que exhiben efectos cuánticos en dispositivos optoelectrónicos actualmente atrae un gran interés. Hoy en día en la literatura científica se discute una amplia gama de aplicaciones para los semiconductores a escala nanométrica: en computación cuántica, fotónica, sistemas fotovoltaicos, biomedicina y otros campos. El tema principal de este trabajo de grado es el estudio computacional del efecto del campo eléctrico externo (efecto Stark) sobre el espectro electrónico en clústeres de puntos cuánticos para elaborar una nueva herramienta teórica para analizar y controlar sus características estructurales y optoelectrónicas. Se resumen los resultados del actual estudio en las siguientes conclusiones.

- Se presentó una metodología general y relativamente sencilla para calcular el espectro energético, propiedades espectrales y eléctricas de un electrón y una donadora confinados en un clúster lineal de QDs.
- En marco de esta metodología, se estudió un clúster de N QDs de material GaAs en

forma de lentes superpuestos sobre una capa húmeda de GaAs, por lo que este sistema se puede considerar como una nanocapa del grosor variable sumergida en material de $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$. La geometría del clúster en este modelo se define a partir de las coordenadas de los centros, los radios y las alturas de los QDs.

- A partir de la morfología de la nanocapa se propuso una expresión analítica del hamiltoniano bidimensional para el potencial de confinamiento del electrón libre y el potencial electrostático de la interacción 2D electrón-donadora en el marco de la aproximación adiabática.
- Se utilizó el método de dobles series de Fourier para resolver la ecuación de Schrödinger, la cual es más eficiente computacionalmente para clústeres con una gran cantidad de QDs en comparación con otros métodos, incluyendo elementos finitos.
- La metodología se aplicó para analizar el efecto Stark en clústeres lineales, considerando como ejemplos tres sistemas: 1) homogéneo con todos los QDs del mismo tamaño, 2) con el QD central de mayor radio y 3) con el QD central de menor radio.
- Se presentaron los resultados de los cálculos para los niveles de energía más bajos, en función de campo eléctrico. Con esto, se demostró la posibilidad de observar el efecto Stark no lineal para campos eléctricos relativamente pequeños tanto para un electrón libre como cuando se encuentra ligado a una donadora, al mostrar la existencia de un punto crítico en las curvas de energía, donde sus pendientes cambian bruscamente bajo un campo eléctrico crítico.
- Sobre la base de las energías obtenidas, se calcularon las características eléctricas de los clústeres, los momentos dipolares y las polarizabilidades, encontrando que en los puntos críticos el momento dipolar sufre un salto brusco, mientras que la polarizabilidad llega a su máximo.
- Se encontró que las curvas de momento dipolar y polarizabilidad tienen comportamiento similar para el electrón libre y la donadora. El valor de campo eléctrico en el punto crítico

para la donadora es superior que para el electrón libre, igualmente moviendo el salto del momento dipolar y el máximo de la polarizabilidad a campos superiores. Este resultado ofrece una posibilidad de usar el efecto Stark para detectar la presencia de impurezas donadoras en clústeres lineales.

- Se presentaron los resultados para las energías de absorción –para el electrón libre y ligado– y la energía de enlace de la donadora en función del valor del campo eléctrico externo. Estos resultados muestran otra posibilidad para detectar experimentalmente la presencia de impurezas usando mediciones del efecto Stark en los clústeres lineales de QDs.
- Se estudió los efectos de cambiar el tamaño del QD central sobre las curvas de los niveles energéticos, momentos dipolares, polarizabilidades, energías de absorción y enlace en función del campo eléctrico externo, que mostraron la estrecha relación de las propiedades optoelectrónicas y eléctricas en clústeres de QDs no homogéneos.
- El estudio realizado en este trabajo demostró la eficacia de la metodología en el estudio computacional de las propiedades optoelectrónicas y eléctricas de clústeres de QDs con diferentes morfologías.

7.2. RECOMENDACIONES

El estudio que se realizó en este trabajo no es todo el análisis posible que este método permite: incluso sin modificar el algoritmo de ninguna forma, es posible hacer estudiar más configuraciones de posiciones, radios y alturas para los puntos cuánticos del clúster.

Si se desea, el método de series de Fourier se puede modificar para, en lugar de tomar solamente los coeficientes reales, introducir elementos complejos para permitir el análisis de potenciales no simétricos con respecto a los ejes, pudiéndose utilizar para cualquier sistema de QDs bajo campos eléctricos arbitrarios.

El mayor problema que encuentra este modelo es el tiempo necesario para construir la matriz del hamiltoniano: en este trabajo se usaron $N_x = N_y = 40$ coeficientes, y ya que se debe iterar bajo 4 variables (n, m, n', m') el resultado es una iteración bajo 40^4 elementos. Gracias a la eficiencia del método de la Transformada de Fourier Rápida (FFT), calcular estos coeficientes en un tiempo razonable no fue un problema, mas si se requiere una precisión mayor sería imperativo aprovechar simetrías en la matriz para minimizar el número de iteraciones requeridas. Por ejemplo, si se toman elementos complejos aprovechar que la matriz será hermitiana y así reducir el número de iteraciones a la mitad.

Otra forma de reducir las iteraciones es separar el campo eléctrico del potencial de confinamiento para resolver cada matriz de forma individual $H = H_1 + V_{elec}$. Por la linealidad de la transformada de Fourier, aumentar el campo eléctrico aplicado sería multiplicar la matriz V_{elec} por una constante, por lo que se eliminaría la necesidad de construir las matrices para cada valor del campo, permitiendo calcular para muchos más valores de campo sin aumentar el tiempo de computación significativamente.

A pesar de esto, opinamos que este trabajo de grado es una buena muestra para la versatilidad y eficacia de este método para analizar los efectos del campo eléctrico en clústeres de puntos cuánticos.

BIBLIOGRAFÍA

- [1] HASSIJA, Vikas, *et al.* Present landscape of quantum computing. En: IET Quantum Communication, tomo 1, N^o 2, 2020, págs. 42–48. 1
- [2] STAMP, Philip C. E. y GAITA-ARIÑO, Alejandro. Spin-based quantum computers made by chemistry: hows and whys. En: J Mater Chem, tomo 19, 2009, págs. 1718–1730. 1
- [3] ADERRAS, L., *et al.* Stark-shift of impurity fundamental state in a lens shaped quantum dot. En: Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, tomo 89, 2017, págs. 119–123. ISSN 1386-9477. 1, 3
- [4] TEMKIN, H., *et al.* Ge_xSi_{1-x} strained \square layer heterostructure bipolar transistors. En: Applied Physics Letters, tomo 52, N^o 13, 1988, págs. 1089–1091. ISSN 0003-6951. 1, 3
- [5] LURYI, S.; KASTALSKY, A. y BEAN, J.C. New infrared detector on a silicon chip. En: IEEE Transactions on Electron Devices, tomo 31, N^o 9, 1984, págs. 1135–1139. 1, 3
- [6] RHEE, S. S., *et al.* Resonant tunneling through a Si/Ge_xSi_{1-x}/Si heterostructure on a GeSi buffer layer. En: Applied Physics Letters, tomo 53, N^o 3, 1988, págs. 204–206. ISSN 0003-6951. 1, 3
- [7] VARSHA, *et al.* Quantum Confined Stark Effect on the Linear and Nonlinear Optical Properties of SiGe/Si Semi Oblate and Prolate Quantum Dots Grown in Si Wetting Layer. En: Nanomaterials (Basel), tomo 11, N^o 6, 2021. 1, 3
- [8] MARÍN, J.H.; GUTIÉRREZ, W. y MIKHAILOV, I.D. Electrical instability of donor states in elongated quantum ring induced by external fields. En: Physica E: Low-dimensional

Systems and Nanostructures, tomo 111, 2019, págs. 98–102. ISSN 1386-9477. 1, 5.2, 5.2

- [9] ESCORCIA, R.A.; GUTIÉRREZ, W. y MIKHAILOV, I.D. Effect of electric field on confined donor states in laterally coupled quantum rings. En: Applied Surface Science, tomo 509, 2020, pág. 145248. ISSN 0169-4332. 1
- [10] RUEDA, Lucas; MIKHAILOV, Ilia y GUTIÉRREZ, Willian. Stark Effect in QDs Linear Cluster. En: IV Congreso Internacional de Ciencias Básicas e Ingeniería. Universidad de los Llanos, Villavicencio, Meta, 2022, pág. 12. 1
- [11] PARK, Hyungjun; SHIN, Dong Jun y YU, Junhua. Categorization of Quantum Dots, Clusters, Nanoclusters, and Nanodots. En: Journal of Chemical Education, tomo 98, N° 3, 2021, págs. 703–709. ISSN 0021-9584. 1
- [12] BAIRA, Mourad, *et al.* Intersubband Optical Nonlinearity of GeSn Quantum Dots under Vertical Electric Field. En: Micromachines, tomo 10, N° 4, 2019. ISSN 2072-666X. 3
- [13] DVOYAN, K.G. y KAZARYAN, E.M. Impurity States in a Weakly Prolate (Oblate) Ellipsoidal Microcrystal Placed in a Magnetic Field. En: physica status solidi (b), tomo 228, N° 3, 2001, págs. 695–703. 3
- [14] BARSEGHYAN, M. G.; KIRAKOSYAN, A. A. y DUQUE, C. A. Donor-impurity related binding energy and photoionization cross-section in quantum dots: electric and magnetic fields and hydrostatic pressure effects. En: The European Physical Journal B, tomo 72, N° 4, 2009, págs. 521–529. ISSN 1434-6036. 3
- [15] BASKOUTAS, S. y TERZIS, A. F. Binding energy of hydrogenic impurity states in an inverse parabolic quantum well under static external fields. En: The European Physical Journal B, tomo 69, N° 2, 2009, págs. 237–244. ISSN 1434-6036. 3

- [16] BASKOUTAS, Sotirios y TERZIS, Andreas. Binding Energy of Hydrogenic Impurity States in an Inverse Parabolic Quantum Well Under Electric and Magnetic Fields Parallel to the Growth Direction. En: Journal of Computational and Theoretical Nanoscience, tomo 7, 2010, págs. 492–497. 3
- [17] DE SOUSA, G. O., *et al.* Unusual quantum confined Stark effect and Aharonov-Bohm oscillations in semiconductor quantum rings with anisotropic effective masses. En: Phys Rev B, tomo 95, 2017, pág. 205414. 3
- [18] GARCÍA, L.F.; REVINOVA, S.Yu. y MIKHAILOV, I.D. Band nonparabolicity effect on spectral properties of quantum ring. En: Superlattices and Microstructures, tomo 103, 2017, págs. 151–160. ISSN 0749-6036. 3
- [19] FRENKEL, Nadav, *et al.* Two Biexciton Types Coexisting in Coupled Quantum Dot Molecules. En: ACS Nano, tomo 17, N^o 15, 2023, págs. 14990–15000. ISSN 1936-0851. 3
- [20] MIN-CHUL CHA AND MYUNG-HOON CHUNG. Single-electron energy levels of a parallel double-quantum dot. En: JOURNAL OF THE KOREAN PHYSICAL SOCIETY, 2002. 3
- [21] GÉLVEZ, Adriana Lucía. Propiedades electrónicas de moléculas artificiales de tres puntos cuánticos acoplados lateralmente. Tesis Doctoral, Universidad Industrial de Santander, 2019. 3
- [22] RAMIREZ, Hanz; CAMACHO, Angela y LEW YAN VOON, Lok. Acoplamiento y localización en cadenas de puntos cuánticos cilíndricos. En: Revista Mexicana de Física, tomo 53, 2007, pág. 78. 3

- [23] MOMMADI, O., *et al.* Exciton–phonon properties in cylindrical quantum dot with parabolic confinement potential under electric field. En: Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, tomo 118, 2020, pág. 113903. ISSN 1386-9477. 3
- [24] JANSSENS, K. L.; PEETERS, F. M. y SCHWEIGERT, V. A. Magnetic-field dependence of the exciton energy in a quantum disk. En: Phys Rev B, tomo 63, 2001, pág. 205311. 3
- [25] PENG, J., *et al.* Heterogeneous confinement in laterally coupled InGaAs/GaAs quantum dot molecules under lateral electric fields. En: Phys Rev B, tomo 81, 2010, pág. 205315. 3
- [26] ESCORCIA, R.; GARCÍA, L.F. y MIKHAILOV, I.D. Magnetoelectric effect in concentric quantum rings induced by shallow donor. En: Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, tomo 99, 2018, págs. 269–274. ISSN 1386-9477. 3
- [27] KASTNER, Marc A. Artificial Atoms. En: Physics Today, tomo 46, N^o 1, 1993, págs. 24–31. ISSN 0031-9228. 4.1
- [28] LÓPEZ LÓPEZ, Máximo y MÉNDEZ GARCÍA, Víctor Hugo. Autoensamblado de puntos cuánticos semiconductores. En: CINVESTAV, tomo 27, N^o 1, 2008, págs. 44–49. ISSN 1870-5499. 4.1
- [29] TEJEDOR, Paloma, *et al.* Linear arrays of InGaAs quantum dots on nanostructured GaAs-on-Si substrates. En: Applied Surface Science, tomo 616, 2023, pág. 156518. ISSN 0169-4332. 2
- [30] ANDO, Tsuneya; FOWLER, Alan B. y STERN, Frank. Electronic properties of two-dimensional systems. En: Rev Mod Phys, tomo 54, 1982, págs. 437–672. 4.1

- [31] BOWLER, D R. Atomic-scale nanowires: physical and electronic structure. En: Journal of Physics: Condensed Matter, tomo 16, N^o 24, 2004, pág. R721. 4.1
- [32] BAYER, Manfred, *et al.* Hidden symmetries in the energy levels of excitonic artificial atoms. En: Nature, tomo 405, 2000, pág. 923–926. 4.2
- [33] AMAHA, Shinichi, *et al.* Fabrication and characterization of a laterally coupled vertical triple quantum dot device. En: Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures, tomo 40, N^o 5, 2008, págs. 1322–1324. ISSN 1386-9477. 4.2
- [34] CORREDOR, Carlos Teofilo y GUTIÉRREZ, Willian. Estados moleculares de puntos cuánticos acoplados lateralmente bajo campos eléctricos. En: Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia, tomo 71, N^o 71, 2014, pág. 17–24. 4.2
- [35] KIM, Jong Su, *et al.* Fabrication of coupled GaAs quantum dots and their optical properties. En: physica status solidi c, tomo 6, N^o 4, 2009, págs. 802–805. 4.2
- [36] ECONOMOU, Sophia E.; LINDNER, Netanel y RUDOLPH, Terry. Optically Generated 2-Dimensional Photonic Cluster State from Coupled Quantum Dots. En: Phys Rev Lett, tomo 105, 2010, pág. 093601. 4.2
- [37] PANYAKEOW, Somsak. Quadra-quantum Dots and Related Patterns of Quantum Dot Molecules:. En: Engineering Journal; Vol 14, No 4 (2010): Integrating Environmental Consideration into Engineering Development; 41 - 56, tomo 14, 2010. 4.2
- [38] PEETERS, F. M. y SCHWEIGERT, V. A. Two-electron quantum disks. En: Phys Rev B, tomo 53, 1996, págs. 1468–1474. 5
- [39] NGUYEN-TRUONG, Hieu T. Exciton binding energy and screening length in two-dimensional semiconductors. En: Phys Rev B, tomo 105, 2022, pág. L201407. 5.2

APÉNDICE

Apéndice A Demostración de la normalización de las funciones base exponenciales

Se tiene la función exponencial $f(x)$ definida como

$$f(x) = Ae^{i\frac{2\pi n}{L}x}, \quad (20)$$

donde L es el período de la función, n un número entero y A la constante de normalización.

Normalizando la función se calcula

$$\int_{-L/2}^{L/2} f^*(x)f(x)dx = A^2 \int_{-L/2}^{L/2} e^{-i\frac{2\pi n}{L}x} e^{i\frac{2\pi n}{L}x} dx = A^2 \int_{-L/2}^{L/2} dx = A^2 L. \quad (21)$$

Para que la función esté normalizada esta integral debe igualarse a 1, entonces

$$A = \frac{1}{\sqrt{L}}. \quad (22)$$

Así, la función normalizada es

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot e^{i\frac{2\pi n}{L}x}. \quad (23)$$

Apéndice B Demostración de la fórmula del hamiltoniano

Como se mostró en la ecuación 16, la matriz $\hat{H}_{nm,n'm'}$ equivale a

$$\hat{H}_{nm,n'm'} = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \varphi_{nm}^*(x, y) \hat{H} \varphi_{n'm'}(x, y) dy. \quad (24)$$

Reemplazando el hamiltoniano por la definición del hamiltoniano obtenido en la ecuación 3, donde $V(x, y)$ es una función par.

$$\hat{H}_{nm, n'm'} = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \varphi_{nm}^*(x, y) (-\Delta_{x,y} + V(x, y)) \varphi_{n'm'}(x, y) dy. \quad (25)$$

Esta integral se puede dividir en dos integrales:

$$I_1 = - \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \varphi_{nm}^*(x, y) \Delta_{x,y} \varphi_{n'm'}(x, y) dy, \quad (26)$$

$$I_2 = \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} \varphi_{nm}^*(x, y) V(x, y) \varphi_{n'm'}(x, y) dy. \quad (27)$$

Resolviendo la primera integral, reemplazando φ_{nm} por las funciones base correspondiente (ecuación 13)

$$I_1 = - \frac{1}{L_x L_y} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy e^{-i2\pi(nx/L_x + my/L_y)} \Delta_{x,y} e^{i2\pi(n'x/L_x + m'y/L_y)} =$$

$$\frac{1}{L_x L_y} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy 4\pi^2(n'^2/L_x^2 + m'^2/L_y^2) e^{-i2\pi(nx/L_x + my/L_y)} e^{i2\pi(n'x/L_x + m'y/L_y)}. \quad (28)$$

La función exponencial se puede describir en términos de senos y cosenos ($e^{i\theta} = \cos \theta + i \sin \theta$), y conociendo el resultado de las siguientes integrales trigonométricas (donde n y m son enteros)

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos(mx) \sin(nx) = 0, \quad (29)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos(mx) \cos(nx) = \int_{-\pi}^{\pi} dx \sin(mx) \sin(nx) = 0, \quad (30)$$

$$\int_{-\pi}^{\pi} dx \cos(mx)^2 = \int_{-\pi}^{\pi} dx \sin(mx)^2 = \pi. \quad (31)$$

Es posible ver que productos mixtos entre seno y coseno se anularán al integrarse, por lo que I_1 se reduce a

$$I_1 = \frac{4\pi^2(n^2/L_x^2 + m^2/L_y^2)}{L_x L_y} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy \left(\cos(2\pi n x/L_x) \cos(2\pi n' x/L_x) + \sin(2\pi n x/L_x) \sin(2\pi n' x/L_x) \right) \left(\cos(2\pi m y/L_y) \cos(2\pi m' y/L_y) + \sin(2\pi m y/L_y) \sin(2\pi m' y/L_y) \right). \quad (32)$$

Aprovechando que la integral también se anula si $m \neq m'$ y $n \neq n'$, se obtiene

$$I_1 = \frac{4\pi^2(n^2/L_x^2 + m^2/L_y^2)}{L_x L_y} \delta_{nn'} \delta_{mm'} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \left(\cos(2\pi n x/L_x)^2 + \sin(2\pi n x/L_x)^2 \right) \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy \left(\cos(2\pi m y/L_y)^2 + \sin(2\pi m y/L_y)^2 \right). \quad (33)$$

Haciendo el reemplazo $\theta = 2\pi x/L_x$ y $\alpha = 2\pi y/L_y$, se obtiene

$$I_1 = \frac{4\pi^2}{L_x L_y} (n'^2/L_x^2 + m'^2/L_y^2) \delta_{nn'} \delta_{mm'} \frac{L_x}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta (\cos^2(n\theta) + \sin^2(n\theta)) \frac{L_y}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha (\cos^2(m\alpha) + \sin^2(m\alpha)). \quad (34)$$

Y así, usando la ecuación 31, se obtiene

$$I_1 = 4\pi^2(n'^2/L_x^2 + m'^2/L_y^2). \quad (35)$$

Para la segunda integral I_2 , se reemplaza las funciones base

$$I_2 = \frac{1}{L_x L_y} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy e^{-i2\pi(n'x/L_x + m'y/L_y)} V(x, y) e^{i2\pi(nx/L_x + my/L_y)}. \quad (36)$$

Reorganizando la función

$$I_2 = \frac{1}{L_x L_y} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy e^{i2\pi x/L_x(n-n')} V(x, y) e^{i2\pi y/L_y(m-m')}. \quad (37)$$

La función exponencial puede describirse como una suma de senos y cosenos. Sin embargo, al ser $V(x, y)$ una función par en x e y , solo quedarán los términos de coseno, pues seno es una función impar. Ya que el producto de una función par e impar es impar, y la integral definida bajo un intervalo de $-T$ a T de una función impar siempre da cero, las integrales sinusoidales se anulan. Así, si llamamos

$$\bar{V}_{k,p} = \frac{1}{L_x L_y} \int_{-L_x/2}^{L_x/2} \cos \frac{\pi k x}{L} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} V(x, y) \cos \frac{\pi p y}{L} dy. \quad (38)$$

la segunda integral equivale a

$$I_2 = \bar{V}_{n-n', m-m'}. \quad (39)$$

Finalmente, la solución para la matriz del hamiltoniano es

$$\hat{H}_{nm, n'm'} = 4\pi^2 \left(\frac{n^2}{L_x^2} + \frac{m^2}{L_y^2} \right) \delta_{nn'} \delta_{mm'} + \bar{V}_{n-n', m-m'}. \quad (40)$$

Apéndice C Demostración de la relación entre la transformada de Fourier y la serie de Fourier en forma compleja

Para una función $f(x)$ el coeficiente de la serie de Fourier c_n (en forma de número complejo) con período T centrado en 0 se puede calcular de la forma mostrada en la ecuación

41.

$$c_n = \frac{1}{T} \int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{-j \frac{2\pi n}{T} x} dx. \quad (41)$$

En cambio, la transformada de Fourier $F(\omega)$ de la función $f(x)$ se calcula como se muestra en la ecuación 42.

$$F(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-j\omega x} dx. \quad (42)$$

En un sistema donde la función es nula fuera del intervalo $[-T/2, T/2]$, la transformada de Fourier se convierte en la forma de la ecuación 43.

$$F(\omega) = \int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{-j\omega x} dx. \quad (43)$$

Así, se ve la relación entre los coeficientes de Fourier y la transformada en la ecuación 44.

$$c_n = \frac{1}{T} F\left(\frac{2\pi n}{T}\right). \quad (44)$$

Los coeficientes para la forma real de la serie de Fourier se pueden hallar en base a la forma compleja. Los coeficientes de coseno son la parte real y los coeficientes de seno la parte imaginaria. En el caso de una función par, la parte imaginaria es cero.

Para hallar los coeficientes en dos dimensiones, se aplica la transformada de Fourier bidimensional, donde se realiza la transformación para cada coordenada.