

**ESTADOS MOLECULARES DE PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS
LATERALMENTE BAJO UN CAMPO ELÉCTRICO**

CARLOS TEÓFILO CORREDOR

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2014**

**ESTADOS MOLECULARES DE PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS
LATERALMENTE BAJO UN CAMPO ELÉCTRICO**

CARLOS TEÓFILO CORREDOR

Tesis de investigación presentada como requisito para optar al título de físico.

Director:

WILLIAN GUTIERREZ NIÑO
Doctor

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA

2014

*A mi amado Dios y mi querida madre,
a mis profesores y amigos ;
Porque sin ellos nunca hubiese superado este viaje de conocimientos y aventuras
y a todas esas personas que me conocieron durante estos años y fueron fieles testigos de todos
mis cambios y éxitos.*

Agradecimientos

Como dijo Albert Einstein: " El hombre encuentra a Dios detrás de cada puerta que la ciencia logra abrir", quiero expresar aquí mis agradecimientos más profundos:

A Dios, por darme la oportunidad de conocer el maravilloso mundo de la física, y además de poner en mi camino infinitas bendiciones que día a día aumentaban mi conocimiento para poder comprender y disfrutar este hermoso universo.

A mi director, el profesor WILLIAN GUTIERREZ NIÑO, un verdadero maestro en todos los sentidos de la palabra, por su entera colaboración y paciencia en todo momento, especialmente durante los tropiezos y debilidades, por su entrega incondicional, su inestimable aprecio y su ejemplar sabiduría, le estaré eternamente agradecido.

Al pueblo colombiano por sostener mi educación a través de sus contribuciones.

A la universidad Industrial de Santander (UIS), quien hizo posible mi participación como ponente en un evento científico.

A, Alexandra Plata a, Sheryl Avendaño a, Fredy Rodríguez a, Elber Rodríguez a, Carlos Perucho a, Alfredo Serrano a, Jimmy Mantilla a, Javier Mejía a, Edilia Quiñones y a, compañeros y amigos incansables a la hora de colaborar, por su sincera amistad, su contagioso entusiasmo y todo su apoyo.

A los Profesores Harold Paredes, Francisco García Russi, Iliá Mikhailov, Arturo plata y Carlos Beltrán, por su valiosa colaboración durante la realización de este trabajo.

A todos ellos, y los muchos amigos que de alguna u otra forma, me alentaron en la tarea de estos últimos quince años.

Dios los bendiga y los acompañe siempre.

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	
1. MARCO TEÓRICO.....	15
1.1 CRECIMIENTO DE QDMs ACOPLADOS LATERALMENTE.....	15
1.2 APROXIMACIÓN DE MASA EFECTIVA.....	18
1.3 LA MOLÉCULA H_2^+	21
2. MODELO TEÓRICO.....	26
3. RESULTADOS.....	28
4. CONCLUSIONES.....	34
CITAS BIBLIOGRAFICAS.....	35
BIBLIOGRAFIA.....	37

Lista de Figuras

Pág.

Figura 1. Imágenes de AFM de: (a) QDs de InAs crecidos sobre una superficie compuesta de montículos escalonados formados por los QDs de InAs sepultados, (b) nano-huecos, (c) nano-huecos recubiertos con una ML de InAs (d) QDMs de InAs. Las figuras (e) - (h) son representaciones esquemáticas un corte vertical de las imágenes superiores correspondientes. L. Wang <i>et al.</i> [23].....	16
Figura 2. (a) Imágenes de nano-huecos, (b) puntos cuánticos en nano-huecos y (c) los perfiles transversales de los nano-huecos en dos diferentes direcciones. Eugenio Zallo <i>et al.</i> [24].....	17
Figura 3. Esquema de la molécula H_2^+	22
Figura 4. Funciones de distribución de probabilidad del electrón en color azul para los orbitales atómicos y en rojo para los orbitales moleculares (enlazante y antienlazante respectivamente) de una H_2^+	22
Figura 5. Solapamiento de los orbitales atómicos para construir un orbital molecular para H_2^+	23
Figura 6. Esquema de las energías y las líneas de densidad electrónica para los estados representados por $(\sigma 1s) \Psi^+ ^2$ y $(\sigma^* 1s) \Psi^- ^2$ de una H_2^+	24
Figura 7. Energía del estado base y primer estado excitado de un sistema H_2^+ , para el caso 3D y 2D, en función de la distancia internuclear [28].....	25
Figura 8. Esquema de la vista superior de un sistema de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente.....	26
Figura 9. Espectro de energía calculado para la QDM con respecto a la distancia entre QDs con un campo eléctrico igual a cero. Los estados moleculares están etiquetados en la tabla de la derecha.....	28
Figura 10. Gráficos de contorno de la densidad de probabilidad de los estados del electrón en una QDM que consta de dos puntos cuánticos de radios iguales.....	30

Figura 11. Detalle de las curvas C y D de la figura 9, con sus correspondientes gráficos de densidad de probabilidad para dos configuraciones estructurales diferentes, una cuando $d = 50nm$ y la otra cuando $d = 70nm$	31
Figura 12. Energía de acople en función de la distancia entre QDs con un campo eléctrico igual a cero.....	32
Figura 13. Los niveles de energía más bajos como una función de la intensidad de campo eléctrico para una distancia $d = 90nm$ entre los dos puntos cuánticos.....	32
Figura 14. Los contornos de las áreas de las densidades de probabilidad del electrón para los dos primeros estados teniendo en cuenta los diferentes valores de campo eléctrico.....	33

Resumen

TITULO: ESTADOS MOLECULARES DE PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS LATERALMENTE BAJO UN CAMPO ELÉCTRICO.

AUTOR: CARLOS TEOFILLO CORREDOR. #*

PALABRAS CLAVES: MOLÉCULA ARTIFICIAL, DOS PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS LATERALMENTE, ESPECTRO ENERGÉTICO DE UN ELECTRÓN, ESTADOS MOLECULARES, EMISOR DE UN ÚNICO FOTÓN CON LONGITUD DE ONDA SINTONIZABLE.

DESCRIPCIÓN:

En el presente trabajo se tuvo en cuenta el marco de la aproximación de masa efectiva con el que se realiza un estudio teórico de los estados moleculares de un electrón atrapado en un sistema formado por dos puntos cuánticos idénticos (de igual radio con un valor de 50nm para cada uno) acoplados lateralmente.

Bajo esta aproximación se estudia el tunelamiento electrónico en nuestra estructura, mediante la variación sucesiva de la distancia (d = distancia comprendida entre los dos centros de cada punto cuántico) entre dos puntos cuánticos acoplados lateralmente (molécula artificial) y se demuestra que el acople cuántico lateral que existe entre éstos permite la formación de estados moleculares, los cuales exhiben características similares a los de una molécula natural H_2^+ .

La clasificación que se ha hecho de dichos estados moleculares es propuesta con base en las consideraciones de simetría, tal como se hace para moléculas naturales. Donde se analiza el efecto de un campo eléctrico para diferentes valores, donde está orientado en el plano xy y específicamente sobre el eje x , la estructura sobre el espectro de energía y nuestros resultados revelan que la longitud de onda de los fotones emitidos por el sistema puede ser sintonizada mediante la aplicación de un campo eléctrico de baja intensidad. Esta característica última es consistente con observaciones experimentales.

#Trabajo de grado.

*Facultad de Ciencias Básicas. Escuela de Física. Director: WILLIAN GUTIERREZ NIÑO, Doctor.

Introducción

La mecánica cuántica no para de dar frutos. En sus inicios nos permitió comprender las leyes que a escala atómica y molecular gobiernan la naturaleza, y con ello quedó bien establecido el hecho de que las propiedades físicas de la materia están definidas básicamente por el tipo de átomos constituyentes, y por la forma como estos átomos están acoplados entre sí. Actualmente, sus frutos son más sorprendentes aún, ya que sus leyes no sólo permiten comprender las propiedades de los materiales que nos ha dado la naturaleza, sino que, junto con las modernas técnicas de simulación computacional, dan la posibilidad de plantear el diseño de nuevos materiales con las propiedades físicas que se requieran. Esta poderosa herramienta de análisis teórico combinada con las técnicas más avanzadas de crecimiento de cristales han dado, por primera vez en la historia, la oportunidad de fabricar materiales que exhiban propiedades únicas y que además brinden la oportunidad de observar nuevos fenómenos físicos. En este sentido una de las áreas que más se ha visto beneficiada es la relacionada con los materiales semiconductores. Los progresos han sido tan sorprendentes, que hoy es posible la fabricación de materiales semiconductores nanoestructurados, es decir materiales en los cuales los parámetros que definen sus propiedades físicas se pueden ajustar con gran exactitud en regiones de sólo algunos nanómetros. Dichos sistemas nanométricos se conocen como nanoestructuras semiconductoras [1] y actualmente hacen parte de los llamados sistemas de baja dimensionalidad (SBD) [2].

Actualmente se fabrica una amplia variedad de nanoestructuras semiconductoras, las cuales desde el punto de vista de su dimensionalidad pueden clasificarse en tres grandes grupos: nanoestructuras quasi-bidimensionales, como es el caso de los pozos cuánticos, nanoestructuras quasi-unidimensionales, como es el caso de los hilos cuánticos, y nanoestructuras quasi-cerodimensionales, como es el caso de los puntos cuánticos. Dentro de todas estas, los denominados puntos cuánticos (QDs-Quantum Dots) son quizás las que gozan de mayor atención debido a sus peculiares características. Básicamente, los QDs pueden considerarse como nanocristales de un material semiconductor con confinamiento cuántico en las tres dimensiones espaciales, ya que sus dimensiones características son típicamente del orden de algunas decenas de nanómetros. Las fronteras físicas de los QDs confinan a los portadores de carga dentro del material. Este confinamiento da lugar a propiedades inusuales que no se manifiestan en materiales de tamaños macroscópicos. Por ejemplo, el silicio es generalmente un pobre emisor de luz en tamaños macroscópicos ya que su estructura de bandas de energía es indirecta, pero se vuelve un buen

emisor de luz cuando se le confina en forma de QDs [3]. El confinamiento de los portadores de carga se puede ajustar variando el tamaño de los QDs, lo cual afecta algunas propiedades fundamentales del material, ya que como es bien sabido, cuando las dimensiones características del nano-cristal son del mismo orden que la longitud de onda de Broglie de los portadores de carga, entonces se da lugar a la observación de efectos cuánticos [4]. Dentro de los rasgos cuánticos más sobresalientes de los QDs, está el hecho de que presentan un espectro de energía discreto, lo cual los hace análogos a los átomos, pero a diferencia de los sistemas atómicos, en estos “átomos artificiales” es posible tener una amplia variedad de geometrías, tamaños y configuraciones en su estado de carga, lo cual nos lleva a pensar en un sinnúmero de posibilidades para potenciales aplicaciones en dispositivos opto-electrónicos con muy baja escala de integración y desempeño superior.

El hecho de pensar los QDs como átomos artificiales lleva naturalmente a considerar la opción de fabricar estructuras en las cuales dichos “átomos” estén cuánticamente acoplados, de tal manera que puedan formar sistemas moleculares o usando los mismos términos: “Moléculas artificiales de QDs”. Una característica que vale la pena destacar de las moléculas de puntos cuánticos (QDMs) es que tienen un número de ventajas sobre las moléculas de átomos reales; su espectro de energía se puede ajustar mediante la variación de la distancia entre los puntos, composición, tamaño, morfología y configuraciones del estado de carga. Este abanico de posibilidades para diseñar las propiedades de estos nanosistemas ha abierto nuevos caminos para aprender física básica de sistemas moleculares y ha proporcionado una base potencial para la fabricación de nuevos dispositivos optoelectrónicos. Una de las potenciales aplicaciones que ha motivado la fabricación y el estudio teórico de los puntos cuánticos autoensamblados que conforman moléculas artificiales es la construcción de un sistema de nanoscópico, que pueda ser utilizado como parte funcional en arquitecturas necesarias para la computación cuántica. Debido a que las operaciones básicas cuánticas pueden llevarse a cabo utilizando un par de puntos cuánticos semiconductores acoplados electrónicamente, el análisis de este sistema es de gran interés para la fabricación de una posible compuerta cuántica que tiene una configuración de carga tipo biestable que representa ya sea "1" o "0" en un sistema binario. Este sistema puede codificar información lógica en los grados de libertad de la carga de un único electrón, y este hecho ha aumentado el interés en los qubits de carga, donde los estados lógicos están representados por los dos estados electrónicos más bajos correspondientes a la localización en los diferentes puntos cuánticos [5, 6].

Basados en lo anterior, no es de extrañar que actualmente exista un gran interés en el estudio de sistemas de pocas partículas confinadas en dichas estructuras. No obstante, si bien es cierto que las condiciones impuestas por el potencial de confinamiento enriquecen notablemente las propiedades optoelectrónicas, también debe tenerse en cuenta que la descripción teórica de estos sistemas artificiales resulta ser una tarea realmente difícil, esto debido a que la ecuación de autovalores debe resolverse en un espacio no homogéneo y anisotrópico. Por otro lado, vale la pena mencionar que el acople lateral entre QDs no es el único que se ha logrado hacer, también recientemente se han podido crecer satisfactoriamente QDs acoplados verticalmente. Pero, mientras las QDMs verticales han sido ampliamente estudiadas teóricamente [7-12], pocos trabajos se han realizado en el caso de QDMs laterales. Un ejemplo es el trabajo realizado por Muñoz y colaboradores [13] en el cual se analizó un electrón en un par de discos cuánticos acoplados lateralmente bajo un campo magnético externo, y mediante una combinación lineal adecuadamente simetrizada de las funciones de onda correspondientes a un solo QD se calcularon los dos primeros niveles de energía del sistema. Otras investigaciones realizadas sobre QDMs son: el cálculo del espectro energético de un electrón en un par de QDs acoplados con confinamiento parabólico mediante el método de diagonalización exacta [14], el análisis de las propiedades eléctricas y ópticas de electrones y huecos bajo un campo magnético externo mediante una metodología en la cual se hace una expansión de las funciones de onda del sistema en términos de funciones de Bloch para el bloque y se considera un pseudopotencial empírico en el Hamiltoniano [15].

Por otro lado existen reportes experimentales en los cuales se han observado características muy interesantes de QDMs, una de ellas reportada por Kiravitaya y su equipo [16] revela que estas estructuras muestran una estrecha e intensa señal por fotoluminiscencia a temperatura ambiente. Además se ha observado una alta calidad óptica por medio de espectroscopia de fotoluminiscencia para una cantidad de QDMs por unidad de área bien específica, reportada por Rastelli y colaboradores [17]. Por otro lado, Beirne y su equipo, demostraron que el nivel de acoplamiento de estos puntos cuánticos se puede controlar por medio de un campo electrostático dirigido a lo largo de la dirección de acoplamiento de la estructura [18] y en otro trabajo concluyeron que con una QDM es posible crear un emisor de un solo fotón en el cual la longitud de onda es sintonizable mediante la aplicación de un campo eléctrico de baja intensidad [19]; Wang y su equipo [20] reportaron que un campo eléctrico resonante puede modificar notablemente la energía de los electrones confinados en la estructura.

Dado que, a la fecha, se han realizado pocos estudios de tipo teórico sobre un par de QDs acoplados lateralmente y puesto que existen interesantes reportes de tipo experimental sobre las propiedades opto-electrónicas que exhiben dichos sistemas, resulta entonces de gran valor cualquier estudio teórico que ayude a ampliar la comprensión que se tiene sobre las propiedades de QDMs. En este sentido es que está motivado el desarrollo de la tesis presente.

1. MARCO TEÓRICO

1.1 Crecimiento de QDs acoplados lateralmente

Los QDs se pueden preparar usando varias técnicas incluyendo las siguientes: litografía, epitaxia de haces moleculares (MBE, *molecular beam epitaxy*) y métodos coloidales. Todos estos métodos comparten la característica común de que el QD es delimitado con un material distinto como frontera. Dentro de las técnicas mencionadas, la epitaxia de haces moleculares aplicada en un modo particular de crecimiento conocido como modo de crecimiento de Stranski-Krastanov [21] ha permitido crecer unas pequeñas islas denominadas puntos cuánticos autoensamblados (SAQD-Self-Assembled Quantum Dots) y actualmente son los que han generado mayores expectativas en torno a su versatilidad para modificar en forma controlada sus tamaños y formas. Además, la fabricación de SAQDs es preferible ya que evita emplear técnicas costosas para delimitar estas nano-estructuras; adicionalmente, no hay daño a los QDs durante su fabricación ya que todo el proceso se realiza durante el crecimiento de los materiales. Sin embargo, para lograr buenos resultados en la aplicación de QDs auto-ensamblados deben satisfacerse requerimientos estrictos en cuanto a la uniformidad en el tamaño, forma y densidad. Esto nos lleva al estudio de la cinética del crecimiento de los QDs auto-ensamblados. Vale la pena destacar que este modo de crecimiento permite la obtención de nano estructuras semiconductoras de muy alta calidad cristalina.

La obtención de SAQDs mediante el modo de crecimiento de Stransky-Krastanov, se basa en la relajación de energía elástica producida por la diferencia en las constantes de red del material a depositar y el sustrato. Ilustraremos este modo de crecimiento tomando como ejemplo el crecimiento de InAs sobre GaAs. Estos cristales poseen diferente constante de red, 6.05\AA del InAs y 5.65\AA del GaAs, lo cual conduce a un desacople de aproximadamente 7%. En las etapas iniciales del depósito de InAs, éste crece acoplado a la red cristalina del sustrato GaAs. A esta primera capa que cubre toda la superficie del sustrato se le conoce como *capa de mojado*. Sin embargo, los esfuerzos debidos al desajuste de los parámetros de red provocan la deformación elástica del InAs acumulando energía elástica conforme avanza el crecimiento. A esta etapa del crecimiento se le denomina *régimen pseudomórfico*. Con el aumento del volumen de InAs depositado, la energía elástica se va acumulando. Esta situación persiste hasta alcanzar un determinado espesor, denominado espesor crítico, para el que la energía acumulada se libera mediante la formación espontánea (o auto-ensamble) de nano-islas tridimensionales coherentes es decir, islas de InAs libres de defectos cristalinos. Este mecanismo de auto-ensamble de nano-estructuras cero-dimensionales permite la síntesis de miles de millones ($10^{10}/\text{cm}^2$) de QDs con diámetros que están entre una y varias decenas de nanómetros con un alto grado de uniformidad en un único paso de crecimiento. Los puntos pueden ser inmediatamente cubiertos por una segunda capa del material sustrato, configurando de esta manera un nano-material con una alta calidad óptica. Como los puntos cuánticos auto-ensamblados tienen un tamaño en la dirección transversal mucho menor que

en la dirección lateral, el potencial de confinamiento en estos sistemas es casi-bidimensional y por eso pueden considerarse como átomos artificiales cuasi-bidimensionales. Por ejemplo un QD con un único electrón confinado en su interior podría considerarse como un átomo artificial de hidrogeno cuasi-bidimensional. Es como si obligáramos al electrón a moverse en una moneda de unas decenas de nanómetros de diámetro y solo unos nanómetros de espesor. En este caso, los estados electrónicos en todas las tres dimensiones son discretos y presentarían un comportamiento completamente cuántico.

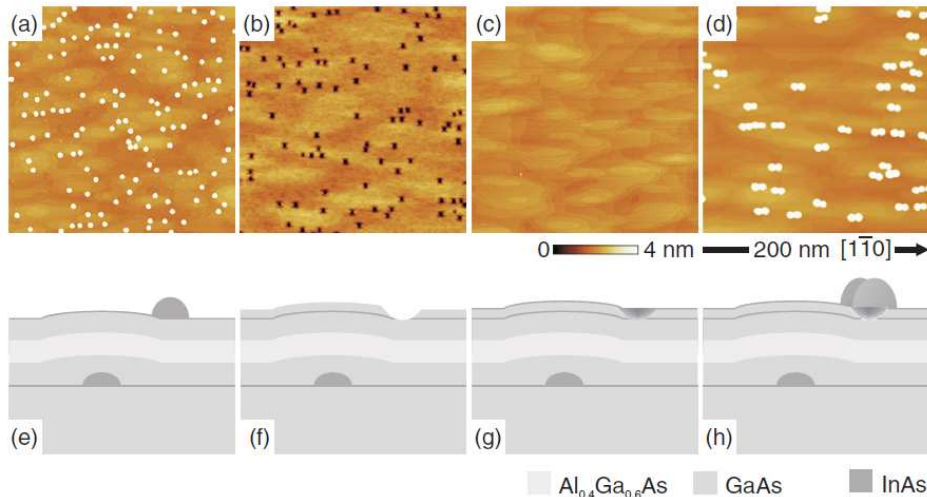


Figura 1. Imágenes de AFM de: (a) QDs de InAs crecidos sobre una superficie compuesta de montículos escalonados formados por los QDs de InAs sepultados, (b) nano-huecos, (c) nano-huecos recubiertos con una ML de InAs, (d) QDMs de InAs. Las figuras (e)-(h) son representaciones esquemáticas de un corte vertical de las imágenes superiores correspondientes. L. Wang *et al.* [23]

Muy recientemente el interés en las técnicas de crecimiento de QDs mediante autoensamblado ha tomado un nuevo rumbo, dado que se ha demostrado el crecimiento de QDs acoplados tanto vertical [22] como lateralmente [23-25]. Esto ha hecho que los QDs autoensamblados comiencen a verse como los ladrillos fundamentales para la fabricación de estructuras más complejas, tales como moléculas de puntos cuánticos (QDMs-Quantum Dot Molecules). En este caso los puntos cuánticos acoplados actuarán de manera similar a como lo hacen los átomos acoplados en una molécula natural. Estas QDMs, en la base de QDs acoplados lateralmente, se han logrado fabricar tomando como punto de partida una capa con alta densidad de QDs de InAs crecidos de forma autoensamblada. Aunque la formación de QDs es casi aleatoria debido a que son procesos relacionados con tensiones, existe alguna preferencia para la nucleación de los QDs en regiones cercanas a bordes. Esto significa que QDs pueden ocasionalmente nuclearse lo suficientemente cerca entre sí para formar QDMs laterales. Sin embargo al modificar la morfología del sustrato es posible crear QDMs laterales en una forma más determinística, por ejemplo sobre las paredes laterales de montículos con bordes altamente escalonados o sobre los bordes y el fondo de nano-agujeros. Existen varias formas de crear los nano-agujeros, y la forma de estos determina la alineación de las QDMs durante el proceso de sobre-crecimiento. Por ejemplo, nano-agujeros pueden ser creados por un tapado parcial de puntos de InAs con GaAs seguido ya sea por un proceso de grabado o un recocido selectivo *in situ*. Los nanoagujeros resultantes tienen típicamente 5 nm de profundidad y

de 45 (70) nm de ancho en las direcciones $[-110]$ ($[110]$). Durante el sobre-crecimiento de InAs se forman QDMs alineadas a lo largo de la dirección $[-110]$ es decir sobre fillos de los agujeros debido a la alta probabilidad de adherencia sobre estos, en particular después de la etapa de agrupamiento se ha producido. El número de puntos por QDM puede controlarse mediante la variación de la temperatura del sustrato durante el crecimiento de InAs y pueden darse desde 2 hasta 6 puntos en una estructura de forma de anillo alrededor de la frontera del nano-agujero cuando la temperatura del sustrato se reduce desde 500 a 450 °C.

El procedimiento experimental se ilustra en la figura 1, y comienza creciendo una capa amortiguadora de GaAs de 200 nm de espesor mediante epitaxia de haz molecular sobre un sustrato de GaAs a una temperatura de 580 °C. El valor rms en la rugosidad de esta superficie es típicamente de 0.24 nm. Luego se crecen puntos autoensamblados de InAs por deposición de 1.8 ML (Mono capas) de InAs seguido por 20 nm de GaAs, 20 nm de $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{As}$ y 20 nm de GaAs a una temperatura del sustrato de 500 °C. Debido a la poca difusión superficial del GaAs a esta temperatura, la superficie de la capa superior muestra montículos escalonados los cuales serán usados para guiar la nucleación de nuevos QDs de InAs. Luego de que se crecen los nuevos QDs de InAs sobre esta superficie, se recubren por 10 nm de GaAs y se realiza entonces un proceso de grabado selectivo in situ con AsBr_3 a con profundidad nominal de 5 nm sobre los QDs sobre-crecidos, para lo cual se ha tomado ventaja del ataque preferencial por QDs de InGaAs sobre GaAs, lo cual llevará a que los QDs sean removidos y en su lugar se formen nano-huecos de 5 nm de profundidad y 45-70 nm de ancho. Posteriormente se procede a llenar dichos nano-huecos con InAs, una vez llenos, por efectos de tensión se producirá la nucleación de un par de QDs en el filo de los huecos, orientándose uno frente al otro, obteniéndose de esta manera una estructura que puede considerarse como un sistema biatómico artificial [23].

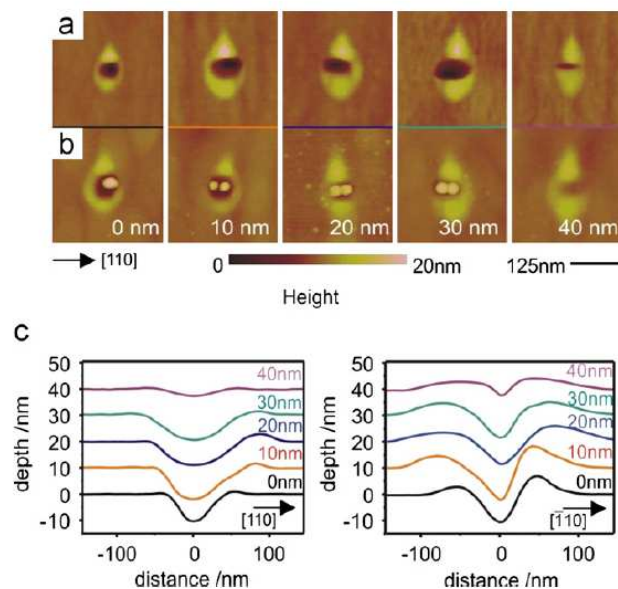


Figura 2. (a) Imágenes de nano-huecos, (b) puntos cuánticos en nano-huecos y (c) los perfiles transversales de los nano-huecos en dos diferentes direcciones. Eugenio Zallo *et al.* [24].

Otra técnica consiste en obtener previamente nano-huecos en una capa de GaAs en cuya deposición variando diferentes parámetros, como temperatura y la densidad de las monocapas se obtienen diferentes simetrías de los nano-huecos [24], de los cuales se puede observar tres formas bien definidas, (circular, elíptica con su eje mayor a lo largo de la dirección [110] y elíptica con su eje mayor alargado en la dirección [110] y su eje menor en la dirección [-110]). Se ha conseguido evidencia que en los nano-huecos con simetría circular al depositar una capa de InAs crece un solo punto cuántico, en los nano-huecos con simetría elíptica se muestra un crecimiento de dos puntos cuánticos autoensamblados lateralmente para nano-huecos con una profundidad en la dirección [110] entre 20 y 30nm, y finalmente en los nano-huecos con la última simetría son rellenados por completo cuando se deposita la capa de InAs (ver figura 2).

1.2 Aproximación de masa efectiva

Un bloque de material semiconductor es en esencia un conjunto de un inmenso número de núcleos atómicos con sus respectivos electrones. Para poder determinar los estados estacionarios y el espectro energético de tal sistema de partículas se debe resolver la ecuación de Schrödinger para el cristal, lo cual resulta prácticamente imposible debido a que el número de variables independientes que describen el sistema está determinado por el número total de partículas del cristal. Por lo tanto frente a estas limitaciones, se hace necesario hacer una serie de aproximaciones sucesivas para poder obtener resultados razonables.

Como primera aproximación se divide todo el sistema de partículas en livianas (electrones) y pesadas (núcleos atómicos). Puesto que la masa del núcleo es mucho mayor que la masa del electrón, se tiene entonces que las velocidades de los electrones superan notoriamente a las velocidades de los núcleos (aproximadamente dos órdenes). Esto permite considerar, en primera aproximación, el movimiento de los electrones en un campo de potencial de núcleos fijos. Tal consideración es conocida como *aproximación adiabática o de Born-Oppenheimer*. Para reducir aún más el número de variables que se tienen, se entra a considerar que los núcleos y sus electrones internos están tan fuertemente ligados que se pueden considerar como una única partícula, de tal forma que cada uno de estos puntos de la red cristalina se considera como una coraza iónica cuya carga neta es la del núcleo menos la de sus electrones internos que lo apantallan. Por lo tanto, para los únicos electrones que se va a considerar variables de movimiento será para los electrones de valencia. A esta aproximación se le conoce como *aproximación de valencia*. A pesar de las simplificaciones ya hechas, todavía resta un hamiltoniano que incluye las órbitas de todos los electrones de valencia, lo cual es un número todavía extraordinariamente grande (10^{23} electrones por cm^3). El siguiente gran paso, es suponer que cada electrón de valencia percibe aproximadamente un mismo potencial promedio efectuado por todos los otros electrones, el cual, debido a las simetrías de la red cristalina, se puede suponer periódico. Esta consideración, llamada *aproximación de campo promedio*, reduce el problema al análisis del movimiento de un electrón con función de onda $\Phi(\vec{r})$ sometido a la siguiente ecuación de Schrödinger:

$$\hat{H}_{1e} \Phi(\vec{r}) = \left(\frac{p^2}{2m_e} + V(\vec{r}) \right) \Phi(\vec{r}) = E_{1e} \Phi(\vec{r}), \quad (1.1)$$

donde el potencial periódico $V(\vec{r})$ subsuma la interacción del electrón con el campo electrónico promedio y la red iónica. Según el *teorema de Bloch*, las soluciones de (1.1) pueden escribirse como una función de Bloch $\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$ donde $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ es periódica bajo cualquier traslación a lo largo de un vector de la red cristalina \vec{R} , esto es, las funciones de Bloch son funciones propias de un operador de traslación: $\hat{T}_{\vec{R}}\Phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}}\Phi_{\vec{k}}(\vec{r})$. Para probar que en verdad existe un tal conjunto de funciones de Bloch que resuelva la ecuación (1.1) basta notar que, debido a la periodicidad de la red, el hamiltoniano \hat{H}_{1e} conmuta con el operador $\hat{T}_{\vec{R}}$ y por lo tanto ambos pueden ser diagonalizados simultáneamente. Debido a que existe cierta arbitrariedad en la elección de \vec{k} en cuanto que cualquier vector $\vec{k} + \vec{G}_n$ (con \vec{G}_n un vector de la red recíproca) es también una posible función de Bloch, estas funciones se clasifican más frecuentemente con los dos índices $\Phi_{n,\vec{k}}(\vec{r})$ donde \vec{k} debe encontrarse dentro de la primera zona de Brillouin (*Esquema en zona reducida*). La dependencia del valor propio $E_{1e}(n,\vec{k})$ es la bien conocida *estructura de bandas electrónica* donde el número n expresa justamente el *índice de la banda*.

Todo lo dicho hasta ahora, vale para el espectro electrónico de un semiconductor volumétrico sin considerar el efecto de ninguna perturbación externa (como campos eléctricos y/o magnéticos) o la presencia de iones distintos (sea una impureza o toda una heteroestructura). Debido a que en este trabajo se deben considerar justamente estas alteraciones respecto al hamiltoniano \hat{H}_{1e} , es preciso explicar cómo se incluyen. La primera aproximación que se puede considerar es el potencial coulombiano $U(\vec{r})$ debido a la presencia de la donadora:

$$\hat{H}'_{1e} = \hat{H}_{1e} + U(\vec{r}) = \frac{p^2}{2m_e} + V(\vec{r}) - \frac{e^2}{\epsilon|\vec{r} - \vec{\xi}|} \quad (1.2)$$

La forma de este potencial, donde el efecto electromagnético de la red cristalina se resume en el apantallamiento hecho por la constante dieléctrica ϵ , se justifica si el movimiento electrónico se desarrolla en una región de un tamaño significativamente mayor al de una celda unitaria. El siguiente paso para resolver (1.2) es el uso de un procedimiento conocido como *aproximación de masa efectiva*, al cual puede llegarse definiendo primero unas funciones llamadas *funciones de Wannier* $a_n(\vec{r}; \vec{R}_i)$ las cuales están relacionadas con las funciones de Bloch de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} a_n(\vec{r}; \vec{R}_i) &= N^{-1/2} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} \Phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) \\ \Phi_{n,\vec{k}}(\vec{r}) &= N^{-1/2} \sum_{\vec{R}_i} e^{i\vec{k}\cdot\vec{R}_i} a_n(\vec{r}; \vec{R}_i) \end{aligned} \quad (1.3)$$

siendo N el número de celdas unitarias del cristal. Los vectores \vec{R}_i son vectores de traslación del cristal. El hecho de que el cristal sea finito obliga a que se deban imponer unas *condiciones de*

frontera periódica (Condiciones de Born-von Kármán) sobre los posibles valores de \vec{k} a tal punto que estos se reducen a un número finito y todos ellos dentro de la primera zona de Brillouin. Por esta razón, para cada valor de n , el conjunto de funciones de Wannier $a_n(\vec{r}; \vec{R}_i)$ forma un conjunto completo de funciones para una solución del hamiltoniano en (1.2) de tal forma que si se tiene un valor propio E el vector propio se puede escribir como $\Phi(\vec{r}) = \sum_{\vec{R}_i} \psi(\vec{R}_i) a_n(\vec{r}; \vec{R}_i)$. A la función $\psi(\vec{R})$ se le conoce como función envolvente. Si el potencial $U(\vec{r})$ varía muy lentamente a lo largo de la red se puede suponer de cierta manera que \vec{R} varía en forma continua. Dadas estas suposiciones y aplicando la forma de $\Phi(\vec{R})$, la ortonormalidad de las funciones de Wannier y de Bloch, y la ecuación (1.3) en la (1.2) se obtiene que

$$\left[E(n, \vec{k}) + U(\vec{R}) \right] \psi(\vec{R}) = E \psi(\vec{R}) ; \quad (1.4)$$

En este caso se debe interpretar $\vec{k} = -i\nabla_{\vec{R}}$ debido a que en el límite continuo $\hbar\vec{k}$ y \vec{R} forman pares de variables canónicas conjugadas análogos a \vec{p} y \vec{r} . El electrón sobrante de la donadora es un electrón que está relativamente libre en comparación con los otros electrones de la red; por consiguiente, se puede hacer uso del *modelo de electrones casi libres* y suponer que la energía de este electrón se encuentra algo por encima del piso de la banda de conducción. Si se supone que sobre esa banda hay un punto mínimo en el centro de la primera zona, isotrópico y no degenerado¹; y que la energía no se separa demasiado de la del piso de la banda de conducción, el operador $E(n, -i\nabla_{\vec{R}})$ se puede aproximar a :

$$E(c, \vec{k}) \approx E(c, 0) + \left[\nabla_{\vec{k}}^2 E(c, 0) \right] k^2 = E_c - \frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla_{\vec{R}}^2, \quad (1.5)$$

con E_c la energía del piso de la banda de conducción y $m^* = \frac{\hbar^2}{2 \left[\nabla_{\vec{k}}^2 E(c, 0) \right]}$ la masa efectiva de los electrones de conducción del material. La ecuación (1.4) queda entonces:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial \vec{R}^2} + U(\vec{R}) \right] \psi(\vec{R}) = (E - E_c) \psi(\vec{R}) \quad (1.6)$$

Una vez considerado el efecto de la donadora, la presencia de una heteroestructura puede hacerse mediante lo que se conoce como la *aproximación de la función envolvente* la cual interpreta las heterojunturas como barreras de potencial cuya altura es la diferencia entre los pisos de las bandas de conducción². En el modelo matemático empleado aquí, esto es equivalente a introducir el potencial adicional $V(\rho, z)$. En este mismo sentido se puede incluir el efecto de un campo eléctrico

¹ Los compuestos considerados en este trabajo cumplen en buen grado estas condiciones.

² También habría una diferencia entre las masas efectivas y las constantes dieléctricas pero estas se despreciarán en este trabajo.

constante F , aplicado en la dirección de crecimiento de la heteroestructura, adicionando el término eFz en el Hamiltoniano del sistema.

Resta, finalmente, la inclusión del campo magnético. Si la función envolvente $\psi(\vec{R})$ fuera realmente un orbital electrónico, la presencia del campo magnético podría incluirse cambiando el operador $-i\hbar \frac{\partial}{\partial \vec{R}} = \vec{p}$ por $\left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)$. Es posible interpretar la función envolvente como un auténtico orbital en el caso de que el movimiento electrónico sea bastante confinado. Debido a que los campos magnéticos aquí considerados son lo suficientemente grandes ($\sim 8.5 T$) y la nanoestructura ofrece una gran barrera de potencial, ese gran confinamiento está asegurado y por tanto dicha interpretación es válida. Se ha llegado entonces a la ecuación de Schrödinger para un electrón confinado en una nanoestructura en presencia de un ión-impureza, de un campo eléctrico en dirección del crecimiento y de un campo magnético:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left(\vec{p} - \frac{e}{c} \vec{A} \right)^2 + V(\rho, z) + eFz - \frac{e^2}{\epsilon |\vec{r} - \vec{\xi}|} \right] \Psi(\vec{r}) = E \Psi(\vec{r}), \quad (1.7)$$

donde se ha cambiado \vec{R} por \vec{r} para enfatizar que Ψ se interpreta como un orbital electrónico. De acuerdo con lo que se ha dicho en esta sección, debe recordarse siempre que tanto E como E_0 deben interpretarse como la energía del electrón medida a partir del piso de la banda de conducción del cristal que conforma el interior de la heteroestructura.

1.3 La Molécula \mathbf{H}_2^+

El caso más simple de una molécula artificial de estado sólido es un sistema de dos puntos cuánticos acoplados electrónicamente por un solo electrón, es decir, un análogo artificial de una molécula de hidrógeno ionizado (\mathbf{H}_2^+). La molécula \mathbf{H}_2^+ está constituida por un par de protones y un único electrón compartido. Dicho sistema, por su relativa simplicidad debido a la ausencia de repulsión electrón-electrón, permite que se pueda resolver su ecuación de Schrödinger sin mayores dificultades y esto lo ha llevado a ser el punto de partida para estudiar los enlaces moleculares de sistemas más complejos. Ahora bien, dada la semejanza que existe entre el sistema considerado en este estudio, el cual consiste de un único electrón compartido entre un par de QDs idénticos lateralmente acoplados, con la molécula natural \mathbf{H}_2^+ [26], tomaremos entonces dicha molécula como el referente para el análisis de nuestro sistema. Con esta motivación abordamos, en lo que sigue, una breve descripción mecano-cuántica de la molécula \mathbf{H}_2^+ .

El ión molecular dihidrógeno \mathbf{H}_2^+ , está constituido por dos átomos de hidrogeno que comparten un mismo electrón mediante un enlace covalente puro, donde la separación entre los núcleos (los cuales están constituidos por un único protón) denotamos como R , la separación desde el núcleo A hasta el electrón (e^-), se denota como r_a , y la separación desde el núcleo B hasta el electrón (e^-), como r_b , tal como se muestra en la figura 3.

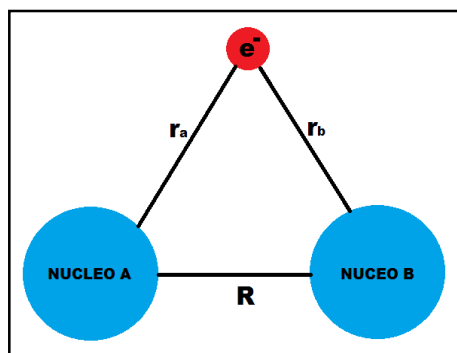


Figura 3. Esquema de la molécula H_2^+ .

La forma en que la mecánica cuántica aborda el problema de una molécula es la misma que utiliza para los átomos, es decir se buscan las energías y las funciones de onda que describen el comportamiento conjunto de todos los núcleos y electrones del sistema. Para obtener una descripción matemática sencilla de los orbitales moleculares del H_2^+ , se utiliza generalmente la aproximación CLOA (Combinación lineal de orbitales atómicos), donde estos orbitales moleculares (OM) pueden considerarse como una combinación lineal de los orbitales atómicos (OA) [27]. Esta aproximación no es arbitraria, pues si suponemos que el electrón del H_2^+ , está en el estado basal, y se encuentra cerca del núcleo A y alejado del B , la función de onda para dicho electrón será parecida a la correspondiente para el átomo H_A , es decir, vendrá dada por una función muy parecida a la $1S_A$, y de forma análoga, cuando el electrón se encuentre cerca del núcleo B y alejado de A , la función puede considerarse como $1S_B$, y esto sugiere una función de onda molecular para H_2^+ en el estado basal como combinación lineal de los orbitales atómicos $1S_A$ y $1S_B$, la cual denominamos como $\psi = C_A \cdot 1S_A + C_B \cdot 1S_B$; cuando el electrón está muy cerca del núcleo A ($r_a \ll r_b$) el término exponencial dará lugar a que la componente $1S_A$ domine la función ψ y se parecerá a la de un átomo de H en el núcleo A , como debe ser. De forma análoga ocurre cuando el electrón está cercano al núcleo B .

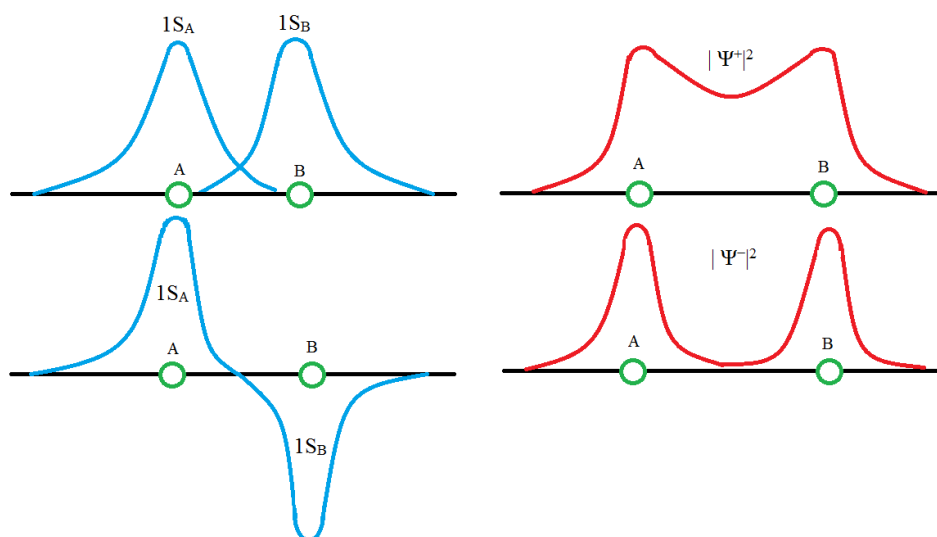


Figura 4. Funciones de distribución de probabilidad del electrón en color azul para los orbitales atómicos y en rojo para los orbitales moleculares (enlazante y antienlazante respectivamente) de una H_2^+

La función densidad de probabilidad electrónica vendrá dada por:

$$|\Psi|^2 = (C_A 1S_A + C_B 1S_B)^2 = (C_A 1S_A)^2 + (C_B 1S_B)^2 + 2 C_A 1S_A C_B 1S_B$$

Para que $|\Psi|^2$ valga lo mismo en los puntos correspondientes a cada lado de la molécula, ya que los núcleos A y B son idénticos, debe cumplirse: $C_B^2 = C_A^2$, lo cual se cumple cuando $C_B = C_A$ o cuando $C_B = -C_A$. Así, para: $C_B = C_A$ se tiene: $\Psi^+ = C_A^+ (1S_A + 1S_B) \rightarrow |\Psi^+|^2 = (C_A^+)^2 ((1S_A)^2 + (1S_B)^2 + 2(1S_A 1S_B))$; y para: $C_B = -C_A$ se tiene: $\Psi^- = C_A^- (1S_A - 1S_B) \rightarrow |\Psi^-|^2 = (C_A^-)^2 ((1S_A)^2 + (1S_B)^2 - 2(1S_A 1S_B))$. Aquí el término $C_A^2 ((1S_A)^2 + (1S_B)^2)$ en $|\Psi^+|^2$ y $|\Psi^-|^2$ es proporcional a la densidad de probabilidad debida a los dos átomos de H separados y no interactuantes.

En la figura 4 puede observarse como, si consideramos la combinación $\Psi^+ = C_A 1S_A + C_B 1S_B$, entonces $|\Psi^+|^2$ tendrá una magnitud significativa sólo en las regiones donde $1S_A$ y $1S_B$ sean a la vez razonablemente grandes, esto es en la región internuclear. Este incremento en el valor de la densidad electrónica en la región internuclear es lo que permite al electrón residir por más tiempo en dicha región y así disminuir la energía del sistema y proporcionar el establecimiento del enlace. Por otro lado, para el caso $\Psi^- = C_A 1S_A - C_B 1S_B$ tenemos que la resta disminuye la probabilidad de encontrar al electrón en la región internuclear, haciendo el sistema más energético y, por tanto, más inestable.

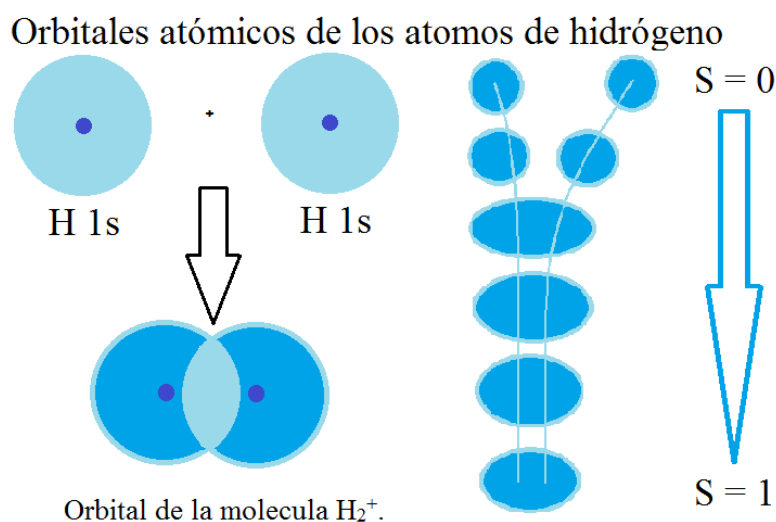


Figura 5. Solapamiento de los orbitales atómicos para construir un orbital molecular para H_2^+ .

Tenemos entonces que las funciones de onda aproximadas y normalizadas para los dos estados electrónicos más bajos en energía del H_2^+ , son:

$$\Psi^+ = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}}(1S_A + 1S_B); \quad \Psi^- = \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}}(1S_A - 1S_B); \quad \text{Con } S = \int_{\nu} (1S_A)(1S_B) d\nu \quad (1.8)$$

Donde S es conocida como *integral de solapamiento* y es una medida del grado de interpenetración de las dos funciones de onda atómicas, la cual depende del tipo de orbitales que estén en juego y de la separación entre los núcleos. La figura 5 muestra una representación esquemática del cambio que sufre el orbital molecular cuando se varía el solapamiento entre dos orbitales atómicos tipo s . Puede apreciarse como al sumarse las dos funciones $1s$, éstas se refuerzan mutuamente en la región internuclear dando una mayor densidad electrónica en esta zona, lo cual contribuye a reducir la

energía del sistema y darle una mayor estabilidad. Así, el orbital molecular resultante tiene característica enlazante y se denota como orbital molecular sigma enlazante, $\sigma 1s$. Al restarse las dos funciones $1s$, la densidad electrónica en la región internuclear disminuye, lo que contribuye a elevar la energía del sistema. Así, el orbital molecular resultante tiene característica antienlazante y se denota como orbital molecular sigma antienlazante, $\sigma^* 1s$. Una representación de estos dos orbitales y sus energías respectivas se muestra en la figura 6.

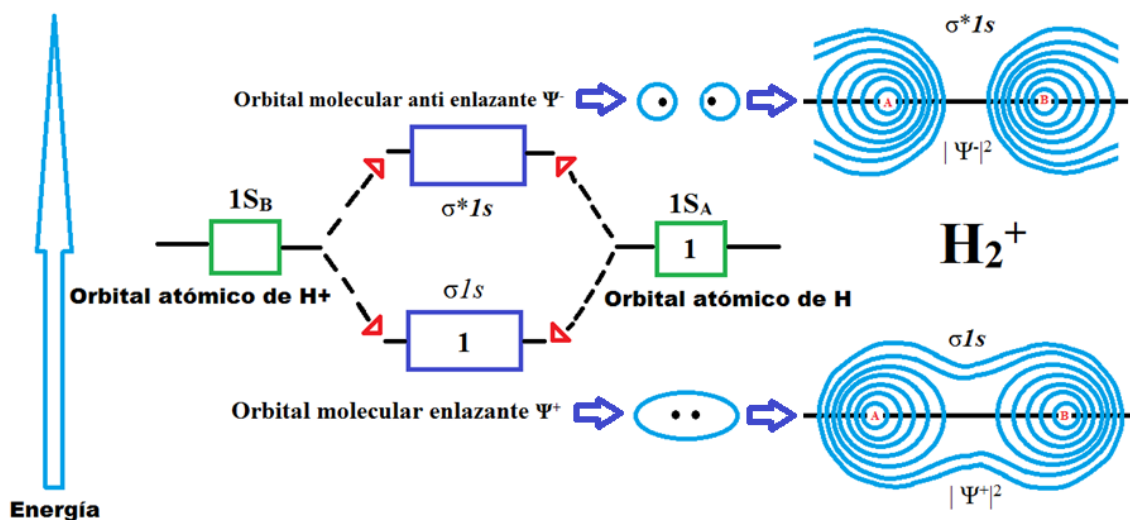


Figura 6. Esquema de las energías y las líneas de densidad electrónica para los estados representados por $(\sigma 1s) |\Psi^+|^2$ y $(\sigma^* 1s) |\Psi^-|^2$ de una H_2^+ .

En la figura 7 se observa una gráfica de un cálculo llevado a cabo por Jia-Lin Zhu *et al* [28], el cual muestra como varía la energía de los dos estados más bajos de una H_2^+ en función de la distancia internuclear, R , para el caso de una molécula en un espacio tridimensional (3D) y en un espacio bidimensional (2D). Puede observarse como para distancias internucleares grandes, la energía del sistema es relativamente insensible a la magnitud de la separación y tiende a ser la misma para ambos orbitales, $-13,6$ eV en el caso 3D y -4 eV en el caso 2D, como era de esperarse. En ambos casos, el 3D y el 2D, a medida que la separación entre núcleos se reduce, entonces tiene lugar un desdoblamiento del nivel de energía debido a la formación de dos orbitales moleculares de naturaleza diferente, un nivel con energía mayor a la energía de los orbitales atómicos (antienlazante) y otro de menor energía (enlazante). Es interesante ver como para el orbital antienlazante la curva de energía no presenta un mínimo, mientras que para el orbital enlazante se tiene la formación de un mínimo, lo cual garantiza la formación de un estado ligado del sistema.

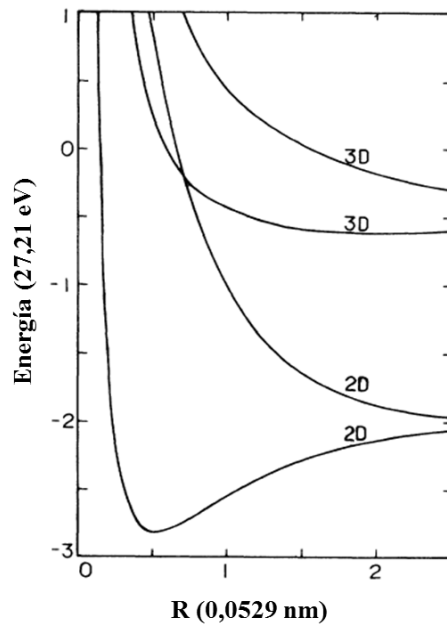


Figura 7. Energía del estado base y primer estado excitado de un sistema H_2^+ , para el caso 3D y 2D, en función de la distancia internuclear [28].

Si se comparan las curvas para los casos 3D y 2D se encuentran notables diferencias. En primer lugar se tiene que la molécula en el caso 2D presenta una mayor estabilidad ya que el pozo de energía que se forma en su nivel enlazante es mucho más profundo que para el caso del espacio 3D. Por otro lado la configuración más estable de la molécula se da para el caso 2D a una distancia internuclear mucho menor ($R \approx 0,25 \text{ \AA}$), de lo que ocurre para el caso 3D ($R \approx 1 \text{ \AA}$). Estos aspectos analizados aquí resultaran de gran utilidad cuando analicemos más adelante los resultados obtenidos para nuestro sistema.

2. MODELO TEÓRICO

Consideramos un sistema de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente de InGaAs / GaAs cargados con un único electrón de conducción en presencia de un campo eléctrico orientado en el plano de la estructura. Dado que los puntos cuánticos auto-ensamblados son capas delgadas y en su mayor parte, tienen una relación pequeña entre las dimensiones de su altura y su base, en este caso se ha considerado un modelo estructural de dos dimensiones para nuestra QDM. Con el fin de obtener resultados que nos permitan analizar cualitativamente la reestructuración del sistema desde un solo QD circular hasta llegar a dos QDs desconectados, adoptamos un modelo basado en un par de círculos que se superponen, lo que nos permite cambiar la topología de la estructura típica para un único QD circular, hasta llegar a dos QDs desconectados, mediante la variación de la separación entre los dos puntos. Los parámetros geométricos de la estructura son: la separación entre puntos a lo largo del eje x , denotada por d sus y radios (R_1 , R_2), que corresponde a los QD_1 y QD_2 , respectivamente. Una representación esquemática de la vista superior de este sistema se muestra en la Figura 8.

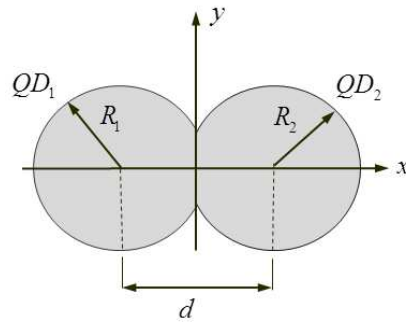


Figura 8. Esquema de la vista superior de un sistema de dos puntos cuánticos acoplados lateralmente.

Como los puntos cuánticos en consideración son mucho más grandes que la celda unidad del material, la aproximación de masa efectiva es un enfoque adecuado y por lo tanto el modelo matemático resultante del electrón confinado en nuestra nanoestructura en presencia de un campo eléctrico uniforme orientado a lo largo del eje x , satisface la ecuación de Schrödinger:

$$\frac{1}{2m^*} \hat{\mathbf{p}}^2 \Psi(x, y) + V(x, y) \Psi(x, y) + eFx \Psi(x, y) = E \Psi(x, y). \quad (2.1)$$

Aquí $V(x, y)$ representa el potencial de confinamiento estructural, el cual se considera igual a cero en el interior de la estructura e infinito fuera de la estructura, y donde $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \left[(\partial/\partial x) \hat{e}_x + (\partial/\partial y) \hat{e}_y \right]$ es el operador del momentum del electrón. Los valores de los parámetros físicos relativos al $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ utilizados en nuestros cálculos son: constante dieléctrica $\epsilon = 15,2$, la masa efectiva para el electrón $m_e = 0,05m_0$, el salto en la banda de conducción en las junturas es $V_{0e} = 450$ meV [29]. La ecuación de eigenvalores (2.1) se resuelve numéricamente utilizando un esquema de elementos finitos triangulares en una malla de dos dimensiones (x, y)

mediante la toolbox de Matlab para solución de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales (PDE Toolbox).

Inicialmente, por propósitos heurísticos, consideramos que la separación entre puntos es cero, en cuyo caso la estructura es un QD perfectamente circular y los valores de energía son los valores propios de un pozo infinito circular. Debido a la simetría circular, la solución se puede escribir en forma de variables separables:

$$\Psi(\rho, \theta) = R(\rho)\Theta_m(\theta) ; \text{ con: } \Theta_m(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\theta}, \text{ para } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.2)$$

Estas soluciones también son estados propios del operador de momento angular $\hat{L} = \hbar/i(\partial/\partial\theta)$ con valores propios $L = m\hbar$. La parte radial $R(\rho)$ son funciones de Bessel de orden entero $J_{|m|}(k\rho)$ y los valores propios de energía cuantizados están determinados por la condición de contorno, $J_{|m|}(k\rho) = 0$. El n-ésimo cero de la función de Bessel de orden m puede ser denotado como $a_{(m, n_r)}$ dónde $n = n_r + 1$ y n_r corresponde al número de nodos radiales en la función de onda, por lo tanto $a_{(0,0)} = 2.405$ es el primer de cero de la función de onda $J_0(k\rho)$, y así sucesivamente. Las soluciones son por lo tanto simultáneas tanto para la energía y como para el momento angular con valores propios dados por:

$$E = \frac{\hbar^2}{2m_e^* R^2} [a_{(m, n_r)}]^2 \quad \text{y} \quad L = m\hbar. \quad (2.3)$$

Cada estado con m diferente de cero es doblemente degenerado debido a los dos valores equivalentes de $m = \pm|m|$, los cuales corresponden a rotaciones en sentido de las manecillas del reloj y en sentido contrario a él, respectivamente.

3. RESULTADOS

Con el objeto de analizar el efecto que tiene el cambio en la topología de una estructura de dos QDs acoplados lateralmente, cuando se lleva desde un típico QD circular hasta llegar a dos QDs desconectados, sobre sus propiedades electrónicas, hemos realizado el cálculo de los niveles de energía más bajos, la densidad de probabilidad de los estados electrónicos y la energía de tunelamiento en función de la separación entre los puntos y de la intensidad de un campo eléctrico externo. Todos los resultados que se presentan a continuación corresponden al caso particular de puntos cuánticos idénticos, es decir, cuando la QDM se compone de dos puntos cuánticos circulares de radios iguales $R_1 = R_2 = 50 \text{ nm}$. Por lo tanto, este modelo nos permite analizar estructuras particulares que presentan perfiles diferentes pero que mantienen una simetría C_2 .

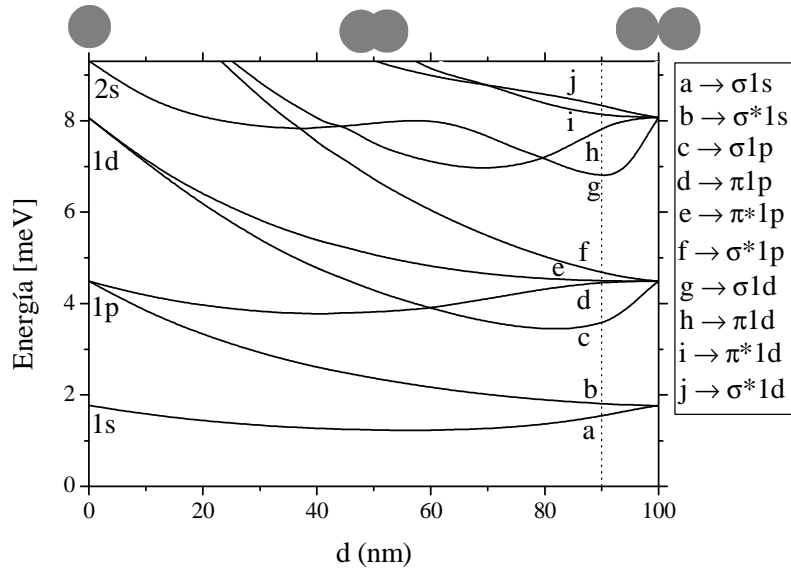


Figura 9. Espectro de energía calculado para la QDM con respecto a la distancia entre QDs con un campo eléctrico igual a cero. Los estados moleculares están etiquetados en la tabla de la derecha.

En la figura 9 mostramos la dependencia de las energías más bajas de un electrón con respecto a la separación entre los QDs para el caso de campo eléctrico igual a cero. Se puede observar que para el caso extremo cuando la separación entre los QDs es cero, la estructura tiene una forma perfectamente circular y los valores de energía son los valores propios correspondientes a un disco cuántico de dos dimensiones, los cuales están doblemente degenerados respecto al número cuántico orbital m (para $m \neq 0$) y los hemos denotado en la figura 9 como 1s, 1p, 1d, 2s,..., tal como se denotan los orbitales atómicos. A medida que aumenta la distancia entre los QDs es decir cuando el sistema experimenta una transición de un QD a una QDM, el espectro de energía se transforma de manera significativa debido a que la simetría circular del perfil de la estructura se rompe, dando como resultado un desdoblamiento de los niveles de energía antes degenerados. Esto está relacionado con el hecho de que el perfil emergente tiene simetría C_2 .

A medida que d aumenta, los niveles se reagrupan formando nuevos conjuntos de niveles degenerados. Como era de esperarse, en el límite cuando $d = 100\text{nm}$, esta nueva estructura energética presenta una degeneración de los estados que es el doble del caso de un QD, lo que corresponde a los valores de energía de dos puntos cuánticos circulares desconectados de radios idénticos. Sin embargo, en las etapas intermedias de esta transformación topológica sucesiva, en la figura 9 se revela que los puntos cuánticos están acoplados electrónicamente y sus orbitales son el resultado de las combinaciones lineales de orbitales de QD individuales, formando así estados moleculares que muestran un carácter enlazante y antienlazante, como en los enlaces moleculares atómicos. En estas curvas se ve que los estados enlazantes siempre presentan energías por debajo de las energías de sus estados antienlazantes correspondientes y de los estados correspondientes del sistema desacoplado, mientras que los estados antienlazantes (marcados con *) siempre están por encima de ellos. Esto es debido a que el acoplamiento es más fuerte en los estados que presentan una alta densidad de probabilidad en la región de intersección de los puntos. Es importante resaltar aquí una importante diferencia del sistema estudiado respecto a una molécula H_2^+ natural. Aunque nuestro sistema tenga estados antienlazantes de manera análoga al caso natural, dichos estados no lo hacen inestable, ya que este es una estructura rígida que confina al electrón, a diferencia de la molécula compuesta por protones, la cual en dichos estados resulta inestable y terminará por disgregarse. En nuestro sistema, dado a que los dos QDs son idénticos, los orbitales 1s del electrón se acoplan fuertemente para formar un par de estados σ , uno de carácter enlazante ($\sigma 1s$) y su correspondiente antienlazante ($\sigma^* 1s$). Los estados 1p que se encuentran a lo largo del eje molecular, es decir, en el eje x, se acoplan fuertemente para formar un par de estados σ como orbitales ($\sigma 1p$, $\sigma^* 1p$), mientras que los estados 1p perpendiculares al eje molecular están acoplados más débilmente y forman orbitales tipo π como ($\pi 1p$, $\pi^* 1p$). Y así podemos seguir la clasificación y el etiquetado de los otros estados emergentes de manera similar a las moléculas axialmente simétricas.

Por otra parte, como nuestra QDM con puntos idénticos tiene una simetría central en el punto medio de la línea que une los QDs, tenemos la posibilidad de clasificar los estados de acuerdo a su paridad. Las funciones de onda de los estados simétricos del electrón no sufren cambios cuando las coordenadas se les cambian de signo, mientras que los estados antisimétricos si cambian de signo. En este punto es muy importante tener en cuenta que los efectos relacionados con la simetría de las moléculas naturales también se observan para los estados electrónicos en las MQDs. Un acople simétrico da el estado de energía más bajo si los dos estados originales que están acoplados tienen la misma fase en la interfaz común. Un acoplamiento antisimétrico da como resultado el estado más bajo si los dos estados originales tienen fase opuesta en la interfaz. Basados en todo lo anterior, vemos en nuestros resultados como existe una notable similitud en las propiedades físicas de la molécula H_2^+ con un sistema formado por dos QDs acoplados lateralmente que comparten un único electrón. Ambos sistemas muestran una discretización de la energía y también dada la simetría C_2 presente en ambos sistemas, se tiene por lo tanto la aparición de estados simétricos y antisimétricos. No obstante, también existen notables diferencias por ejemplo, el potencial de confinamiento es más débil en los átomos artificiales que en los naturales, ya que el tamaño de las nanoestructuras resulta ser mucho mayor que la distancia interatómica ($d \approx 1000R$), esto lleva a que los valores de la energía para el electrón difieran también en 3 órdenes de magnitud. Además la estructura artificial permite la existencia de estados ligados en un sinnúmero de configuraciones relacionadas con el tamaño, la forma y la distancia entre QDs, aspecto que resulta imposible en el caso natural,

ya que solo una configuración es posible para dicha molécula. Por otro lado, la molécula artificial no tiene la repulsión Coulombiana que existe entre los núcleos atómicos y su correspondiente energía cinética, ya que la pareja de QDs tiene una estructura completamente rígida, aspecto que facilita el análisis teórico.

State	d=0 nm	d=60 nm	d=90 nm	State
1s				$\sigma 1s$
1p				$\sigma^* 1s$
1p				$\sigma 1p$
1d				$\pi 1p$
1d				$\pi^* 1p$
2s				$\sigma^* 1p$
1f				$\sigma 1d$
1f				$\pi 1d$
2p				$\pi^* 1d$
2p				$\sigma^* 1d$
1g				$\sigma 2s$
1g				$\sigma^* 2s$

Figura 10. Gráficos de contorno de la densidad de probabilidad de los estados del electrón en una QDM que consta de dos puntos cuánticos de radios iguales.

Con el fin de ver más claramente las características de los orbitales moleculares de nuestro sistema, en la figura 10 se muestra los gráficos de la densidad de probabilidad correspondientes a los doce estados más bajos del electrón considerando diferentes distancias d entre los puntos con un campo

eléctrico igual a cero. Pueden observarse tres regímenes diferentes: un solo punto cuántico ($d = 0 \text{ nm}$), dos puntos cuánticos fuertemente acoplados ($d = 60 \text{ nm}$) y dos puntos cuánticos débilmente acoplados con ($d = 90 \text{ nm}$). En estas imágenes se identifican claramente los orbitales correspondientes a los estados atómicos en la columna de la izquierda y los orbitales correspondientes a los estados moleculares en las columnas del centro y la derecha, que están en perfecto acuerdo con la clasificación que se muestra en la figura 9. Además, se puede ver que los estados moleculares muestran estados con carácter enlazante y antienlazante, como ocurre precisamente en los enlaces moleculares atómicos.

Un aspecto importante que los gráficos de contorno ayudan a aclarar, es el hecho de si las curvas de la figura 9 muestran realmente un cruce en los niveles de energía. Nuestros resultados muestran que en QDMs, al igual que en las moléculas diatómicas, sólo los términos con diferente simetría pueden cruzarse, mientras que la intersección de los términos con igual simetría, es imposible. Este resultado no sólo es cierto para las moléculas diatómicas, sino que es un teorema general de la mecánica cuántica [30]. Tomando el caso particular de las curvas C y D de la figura 9, correspondiente a los estados $\sigma 1p$ y $\pi 1p$, respectivamente, en la figura 11 se muestran las gráficas de densidad de probabilidad correspondientes a dos configuraciones estructurales diferentes, una cuando $d = 50 \text{ nm}$ y la otra cuando $d = 70 \text{ nm}$. Después de observar las gráficas de contorno entonces podemos llegar a la conclusión de que existe realmente un cruce de estos dos niveles, ya que estos estados tienen diferente paridad.

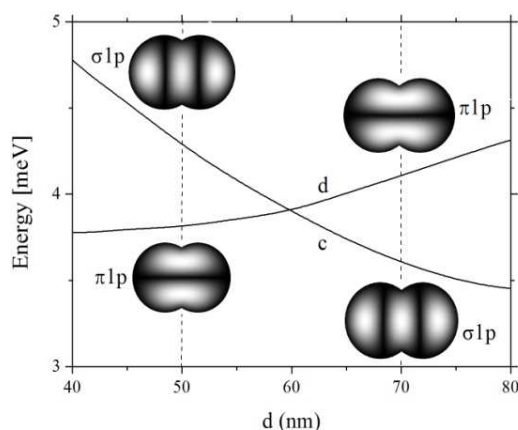


Figura 11. Detalle de las curvas C y D de la figura 9, con sus correspondientes gráficos de densidad de probabilidad para dos configuraciones estructurales diferentes, una cuando $d = 50 \text{ nm}$ y la otra cuando $d = 70 \text{ nm}$.

La separación energética entre los dos niveles de energía más bajos (enlazante y antienlazante) es llamada energía de tunelamiento o de acople cuántico, dicha energía indica la intensidad de los enlaces moleculares y tiene importantes implicaciones prácticas en el diseño de dispositivos de QDMs, donde esta determina el grado de entrelazamiento cuántico y afecta el transporte de electrones. Para nuestra QDM, la energía de acople correspondiente a los estados $\sigma 1s$ y $\sigma^* 1s$ se muestra en la figura 12. Puede verse que esta disminuye monótonicamente con el aumento de la distancia entre los puntos, lo que está en completo acuerdo con los gráficos de contorno mostrados previamente en la figura 10. Esto se debe básicamente a que una mayor separación entre los QDs implica que la función de onda del electrón se encuentra más fuertemente localizada dentro de los

puntos cuánticos, reduciéndose así la probabilidad de encontrar el electrón en la región entre puntos, y por lo tanto el acople cuántico.

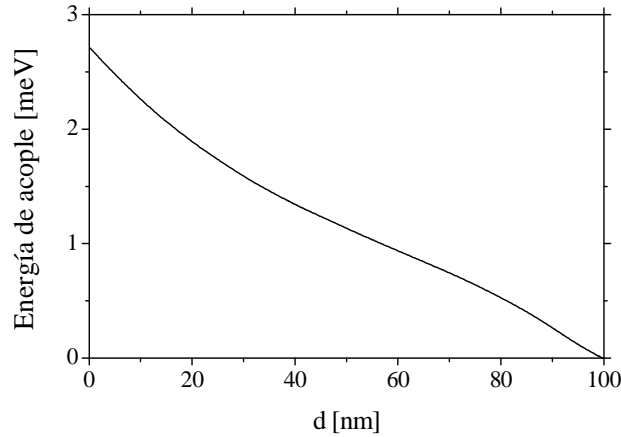


Figura 12. Energía de acople en función de la distancia entre QDs con un campo eléctrico igual a cero.

En la figura 13 mostramos las energías más bajas de un electrón en una QDM con la separación entre QDs igual a $d = 90\text{nm}$ en función de la intensidad de un campo eléctrico uniforme aplicado a lo largo del eje x . El comportamiento de las diferentes curvas revela características interesantes del sistema. En primer lugar, se puede ver que los niveles de energía correspondientes a los estados enlazantes decrecen a medida que la intensidad del campo se incrementa, mientras que para el caso de los estados antienlazantes los correspondientes niveles se incrementan. El comportamiento anterior conduce a la aparición de algunos cruces entre los niveles.

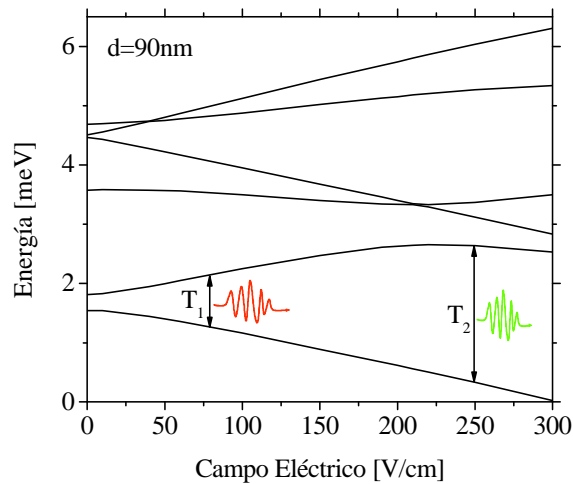


Figura 13. Los niveles de energía más bajas como una función de la intensidad de campo eléctrico para una distancia $d = 90\text{nm}$ entre los dos puntos cuánticos.

Otra característica interesante es el hecho de que algunos niveles muestran una tendencia cuasi-lineal en el rango que se muestra, por lo tanto, se puede decir que sus correspondientes orbitales son

ligeramente perturbados y que en esencia retienen su carácter enlazante o antienlazante. Contrariamente a esto, se puede observar el comportamiento del nivel de σ^*1s , que inicialmente se incrementa linealmente hasta que alcanza un máximo alrededor de 225 V / cm, y luego empieza a disminuir. Por último, nuestros resultados ponen en evidencia el hecho de que un campo eléctrico aplicado a una QDM puede cambiar la separación entre los dos primeros niveles, es decir, la energía de acople, como se muestra en la Figura 13. En este sentido, el sistema en cuestión se puede utilizar para crear un emisor de fotones cuya longitud de onda es sintonizable mediante la simple aplicación de un campo eléctrico de baja intensidad. Vale la pena señalar que estos resultados están en concordancia con anteriores resultados experimentales [31].



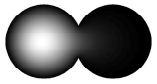






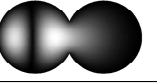
State	F=0 V/cm	F=50 V/cm	F=100 V/cm	F=200 V/cm	F=300 V/cm
$\sigma 1s$					
$\sigma^* 1s$					

Figura 14. Los contornos de las áreas de las densidades de probabilidad del electrón para los dos primeros estados teniendo en cuenta los diferentes valores de campo eléctrico.

En la Figura 14, se muestra contornos de las densidades de probabilidad del electrón para el estado fundamental y el primer estado excitado teniendo en cuenta cuatro diferentes valores del campo eléctrico lateral aplicada a lo largo del eje x . Se observa como estos estados del electrón experimentan una transición suave, como si el campo eléctrico halara la función de onda de un punto al otro. Uno puede ver claramente cómo el estado $\sigma 1s$ concentra su densidad de probabilidad en el QD izquierdo, mientras que en el estado $\sigma^* 1s$ se concentra inicialmente en el QD derecho, pero cuando la intensidad de campo eléctrico alcanza el valor de 200 V / cm, este estado se somete a cambios interesantes, pasando de antienlazante a enlazante, lo cual es consistente con el comportamiento mostrado en la figura 13. Además se puede observar como la distribución de probabilidad adquiere la forma de un orbital tipo p localizado casi exclusivamente en el QD de la izquierda, esto para diferenciarse del primer estado, el cual adquirió la forma de un orbital tipo s . Tal resultado puede ratificarse en la figura 13 cuando el campo tiene una intensidad de 300 V / cm, en este caso la diferencia entre estos dos niveles es de 2,5 meV aproximadamente, lo cual concuerda con la diferencia de energía entre los estados $1s$ y $1p$ para el caso de un único QD mostrado en la figura 9.

4. CONCLUSIONES

En conclusión, nuestros resultados revelan claramente la existencia de acoplamiento cuántico lateral entre dos puntos cuánticos auto-ensamblados. Nuestro modelo simple para una QDM con un electrón predice la formación de estados moleculares de tipo enlazante y antienlazante entre los dos puntos. Por medio de una transformación topológica sucesiva se mostró como tiene lugar una transición de los estados desde un régimen de tipo atómico (un único QD), pasando a través de un régimen molecular (dos QDs fuertemente acoplados), hasta llegar al caso de dos QDs con un acoplamiento muy débil entre sí (dos QDs no acoplados). Con el fin de entender mejor el comportamiento de los estados moleculares de las QDMs, estos se han clasificado y etiquetado de manera similar a como se hace para las moléculas naturales axialmente simétricas. Nuestros resultados también muestran que se puede tener control sobre el nivel de acoplamiento usando un campo eléctrico aplicado a lo largo del eje molecular. Este último resultado abre la posibilidad de cambiar la energía de emisión para un único fotón en una QDM por medio de un campo eléctrico de baja intensidad, lo cual puede dar pie para fabricar emisores de fotones con longitud de onda sintonizable mediante campos eléctricos.

CITAS BIBLIOGRAFICAS

- [1] P. Harrison, "Quantum Wells, Wires and Dots". *Wiley-Interscience*. **1**, 381(2005).
- [2] M. R. Geller. "Quantum Phenomena In Low-Dimensional Systems". *arXiv:cond-mat*. **1**, 0106256 (2001).
- [3] Pavesa L., Dal Negro L., Mazzoleni C., Franzo G. y Priolo F. "Optical gain in silicon nanocrystals". *Nature*. **408**, 440 (2000).
- [4] Sohn, Lydia L.; Kouwenhoven, Leo P.; Schön, Gerd; "Mesoscopic Electron Transport". *NATO Science Series*. **345**, Proceeding of the NATO Advanced Study Institute (1996).
- [5] D. Bouwmeester, A. Ekert, A. Zeilinger. "The Physics of Quantum Information". Ed. Springer. Berlin. (2000).
- [6] Kamada H. "Quantum computing with QD excitons". *NTT Tech. Rev.* **1**, 30 (2003).
- [7] I. D. Mikhailov, L. F. García, J. H. Marín. "Vertically coupled quantum dots charged by exciton". *Microelectronics Journal*. **39**, 378 (2008).
- [8] J. L. Liu, S. S. Li, Z. C. Niu, F. H. Yang, S. Li Feng. "Electronic structure of coupled vertically stacked self-assembled InAs quantum disks in a vertical electric field". *Superlattices and Microstructures*. **33**, 29 (2003).
- [9] M. Korkusinski, P. Hawrylak. "Electronic structure of vertically stacked self-assembled quantum disks". *Physical Review B*. **63**, 195311 (2001).
- [10] L. He, G. Bester, A. Zunger. "Electronic asymmetry in self-assembled quantum dot molecules made of identical InAs/GaAs quantum dots". *Phys. Rev. B*. **72**. 081311 (2005).
- [11] W. Gutiérrez, J. H. Marin, I. D. Mikhailov. "Charge transfer magnetoexciton formation at vertically coupled quantum dots". *Nanoscale Research Letters*. **7**, 585 (2012).
- [12] J. Planelles, J. I. Climente, F. Rajadell, M. F. Doty, A. S. Bracker, D. Gammon. "Effect of strain and variable mass on the formation of antibonding hole ground states in InAs quantum dot molecules". *Phys. Rev. B*. **82**, 155307 (2010).
- [13] E. Muñoz, Z. Barticevic, M. Pacheco. "Electronic spectrum of two coupled semiconductor quantum disks under external fields". *Microelectronics Journal*. **34**, 733 (2003).
- [14] M. C. Cha, M. H. Chung. "Single-Electron Energy Levels of a Parallel Double-Quantum Dot". *Journal of the Korean Physical Society*. **41**, 359 (2002).
- [15] J. Peng, C. Hermannstädter, M. Witzany, M. Heldmaier, L. Wang, S. Kiravittaya, A. Rastelli, O. G. Schmidt, P. Michler, G. Bester. "Heterogeneous confinement in laterally coupled InGaAs/GaAs quantum dot molecules under lateral electric fields". *Phys. Rev. B*. **81**, 205315 (2010).
- [16] S. Kiravittaya, R. Songmuang, N. Y. Jin-Phillipp, S. Panyakeow, O. G. Schmidt. "Self-assembled nanoholes and lateral QD bi-molecules by molecular beam epitaxy and atomically precise in situ etching". *Journal of Crystal Growth*. **1**, 251 (2003).

- [17] L. W. A. Rastelli, S. Kiravittaya, R. Songmuang, O. G. Schmidt, B. Krause, T. H. Metzger. “Guided self-assembly of lateral InAs/GaAs quantum-dot molecules for single molecule spectroscopy”. *Nano Express. Nanoscale Res Lett* (2006).
- [18] G. J. Beirne, C. Hermannstädter, L. Wang, A. Rastelli, O. G. Schmidt, and P. Michler. “Control of Tunnel Coupling using a Lateral Quantum Dot Molecule”. *Society of America, OCIS*. **270.5290**, 300.6470 (2006).
- [19] G. J. Beirne, C. Hermannstädter, L. Wang, A. Rastelli, O. G. Schmidt, P. Michler. “Quantum light emission of two lateral tunnel-coupled (In,Ga)As/GaAs Quantum Dot controlled by a tunable static electric field”. *Physical Review Letters*. **96**, 137401 (2006).
- [20] J. Wang, DeshuangShang , HuibingMao , J. Yu , QiangZhao , P. Yang, HuaizhongXing. “Strain effects on resonant parameters in a symmetric In_{1-x}GaxAs quantum dot Molecules”. *Phys. Rev. B*. **408**, 9 (2013).
- [21] J. Stangl, V. Holy, and G. Bauer. “Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures” *Rev. Mod. Phys.* Vol. **76**, No. 3, 725-783 (2004)
- [22] Z. R. Wasilewski, S. Fafard, J.P. McCaffrey. “Size and shape engineering of vertically stacked self-assembled quantum dots”. *Journal of Crystal Growth* **201/202**, 1131 (1999)
- [23] L. Wang, A. Rastelli, S. Kiravittaya, P. Atkinson, F. Ding, C. C. BofBufon, C. Hermannstädter, M. Witzany, G. J. Beirne, P. Michler and O. G. Schmidt. “Towards deterministically controlled InGaAs/GaAs lateral quantum dot molecules”. *New Journal of Physics*. **10**, 045010 (2008).
- [24] Eugenio Zallo, Paola Atkinson, Armando Rastelli, Oliver G. Schmidt. “Controlling the formation of quantum dot pairs using nanohole templates”. *Journal of Crystal Growth*. **338**, 232 (2012).
- [25] G. J. Beirne, C. Hermannstädter, L. Wang, A. Rastelli, O. G. Schmidt, and P. Michler. “Quadrant Quantum Dots and Related Patterns of Quantum Dot Molecules”. *Phys Lett*. **96**, 137401 (2006).
- [26] William Gutiérrez Niño. “Estados ligados de portadores de carga en nanoestructuras semiconductoras”. *Tesis doctoral. Universidad Industrial de Santander*. **1**, 9 (2008).
- [27] E. Cartmell, G. W. A. Fowles. “Introducción a la teoría cuántica de la Valencia y su aplicación a la química estructural”. *Editorial Reverte*. Barcelona (1954).
- [28] Jia-Lin Zhu, Jia-Jiong Xiong. “Hydrogen molecular ions in two dimensions”. *Phys. Rev. B*. **41**, 12274 (1990).
- [29] M. Califano, P. Harrison. “Presentation and experimental validation of a single-band, constant-potential model for self-assembled InAs/GaAs quantum dots”. *Physical Review B*. **61**. 10959 (2001).
- [30] L. D. Landau, E. M. Lifshitz. “Quantum mechanics, Non-relativistic theory”. Third edition. Pergamon Press. 302-305 (1977).
- [31] G. J. Beirne, C. Hermannstädter, L. Wang, A. Rastelli, O. G. Schmidt, P. Michler. “Quantum light emission of two lateral tunnel-coupled (In,Ga)As/GaAs Quantum Dot controlled by a tunable static electric field”. *Physical Review Letters*. **96**. 137401 (2006).

BIBLIOGRAFIA

D. Bouwmeester, A. Ekert, A. Zeilinger. "The Physics of Quantum Information". Ed. Springer. Berlin. (2000).

E. Cartmell, G. W. A. Fowles. "Introducción a la teoría cuántica de la Valencia y su aplicación a la química estructural". *Editorial Reverte*. Barcelona (1954).

E. Muñoz, Z. Barticevic, M. Pacheco. "Electronic spectrum of two coupled semiconductor quantum disks under external fields". *Microelectronics Journal*. **34**, 733 (2003).

Eugenio Zallo, Paola Atkinson, Armando Rastelli, Oliver G. Schmidt. "Controlling the formation of quantum dot pairs using nanohole templates". *Journal of Crystal Growth*. **338**, 232 (2012).

G. J. Beirne, C. Hermannstädter, L. Wang, A. Rastelli, O. G. Schmidt, and P. Michler. "Control of Tunnel Coupling using a Lateral Quantum Dot Molecule". *Society of America, OCIS*. **270.5290**, 300.6470 (2006).

G. J. Beirne, C. Hermannstädter, L. Wang, A. Rastelli, O. G. Schmidt, P. Michler. "Quantum light emission of two lateral tunnel-coupled (In,Ga)As/GaAs Quantum Dot controlled by a tunable static electric field". *Physical Review Letters*. **96**, 137401 (2006).

G. J. Beirne, C. Hermannstädter, L. Wang, A. Rastelli, O. G. Schmidt, and P. Michler. "Quadra-Quantum Dots and Related Patterns of Quantum Dot Molecules". *Phys Lett*. **96**, 137401 (2006).

I. D. Mikhailov, L. F. García, J. H. Marín. "Vertically coupled quantum dots charged by exciton". *Microelectronics Journal*. **39**, 378 (2008).

J. L. Liu, S. S. Li, Z. C. Niu, F. H. Yang, S. Li Feng. "Electronic structure of coupled vertically stacked self-assembled InAs quantum disks in a vertical electric field". *Superlattices and Microstructures*. **33**, 29 (2003).

J. Peng, C. Hermannstädter, M. Witzany, M. Heldmaier, L. Wang, S. Kiravittaya, A. Rastelli, O. G. Schmidt, P. Michler, G. Bester. "Heterogeneous confinement in laterally coupled InGaAs/GaAs quantum dot molecules under lateral electric fields". *Phys. Rev. B*. **81**, 205315 (2010).

J. Planelles, J. I. Climente, F. Rajadell, M. F. Doty, A. S. Bracker, D. Gammon. "Effect of strain and variable mass on the formation of antibonding hole ground states in InAs quantum dot molecules". *Phys. Rev. B*. **82**, 155307 (2010).

J. Stangl, V. Holy, and G. Bauer. "Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures" *Rev. Mod. Phys.* Vol. **76**, No. 3, 725-783 (2004).

J. Wang, DeshuangShang, HuibingMao, J. Yu, QiangZhao, P. Yang, HuaizhongXing. "Strain effects on resonant parameters in a symmetric In_{1-x}Ga_xAs quantum dot Molecules". *Phys. Rev. B*. **408**, 9 (2013).

- Jia-Lin Zhu, Jia-Jiong Xiong. "Hydrogen molecular ions in two dimensions". *Phys. Rev. B.* **41**, 12274 (1990).
- Kamada H. "Quantum computing with QD excitons". *NTT Tech. Rev.* **1**, 30 (2003).
- L. D. Landau, E. M. Lifshitz. "Quantum mechanics, Non-relativistic theory". Third edition. Pergamon Press. 302-305 (1977).
- L. He, G. Bester, A. Zunger. "Electronic asymmetry in self-assembled quantum dot molecules made of identical InAs/GaAs quantum dots". *Phys. Rev. B.* **72**, 081311 (2005).
- L. W. A. Rastelli, S. Kiravittaya, R. Songmuang, O. G. Schmidt, B. Krause, T. H. Metzger. "Guided self-assembly of lateral InAs/GaAs quantum-dot molecules for single molecule spectroscopy". *Nano Express. Nanoscale Res Lett* (2006).
- L. Wang, A. Rastelli, S. Kiravittaya, P. Atkinson, F. Ding, C. C. BofBufon, C. Hermannstädter, M. Witzany, G. J. Beirne, P. Michler and O. G. Schmidt. "Towards deterministically controlled InGaAs/GaAs lateral quantum dot molecules". *New Journal of Physics.* **10**, 045010 (2008).
- M. C. Cha, M. H. Chung. "Single-Electron Energy Levels of a Parallel Double-Quantum Dot". *Journal of the Korean Physical Society.* **41**, 359 (2002).
- M. Califano, P. Harrison. "Presentation and experimental validation of a single-band, constant-potential model for self-assembled InAs/GaAs quantum dots". *Physical Review B.* **61**, 10959 (2001).
- M. Korkusinski, P. Hawrylak. "Electronic structure of vertically stacked self-assembled quantum disks". *Physical Review B.* **63**, 195311 (2001).
- M. R. Geller. "Quantum Phenomena In Low-Dimensional Systems". *arXiv:cond-mat.* **1**, 0106256 (2001).
P. Harrison, "Quantum Wells, Wires and Dots". *Wiley-Interscience.* **1**, 381(2005).
- Pavesa L., Dal Negro L., Mazzoleni C., Franzo G. y Priolo F. "Optical gain in silicon nanocrystals". *Nature.* **408**, 440 (2000).
- S. Kiravittaya, R. Songmuang, N. Y. Jin-Phillipp, S. Panyakeow, O. G. Schmidt. "Self-assembled nanoholes and lateral QD bi-molecules by molecular beam epitaxy and atomically precise in situ etching". *Journal of Crystal Growth.* **1**, 251 (2003).
Sohn, Lydia L.; Kouwenhoven, Leo P.; Schön, Gerd; "Mesoscopic Electron Transport". *NATO Science Series.* **345**, Proceeding of the NATO Advanced Study Institute (1996).
- W. Gutiérrez, J. H. Marin, I. D. Mikhailov. "Charge transfer magnetoexciton formation at vertically coupled quantum dots". *Nanoscale Research Letters.* **7**, 585 (2012).

Willian Gutiérrez Niño. “Estados ligados de portadores de carga en nanoestructuras semiconductoras”. *Tesis doctoral. Universidad Industrial de Santander*. **1**, 9 (2008).

Z. R. Wasilewski, S. Fafard, J.P. McCaffrey. “Size and shape engineering of vertically stacked self-assembled quantum dots”. *Journal of Crystal Growth* **201/202**, 1131 (1999).

