

**PROPIEDADES ELÉCTRICAS DE UNA IMPUREZA DONADORA CONFINADA  
EN DOS PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS DE  $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$**

LAURA MARCELA MONTAÑO VILLA

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER  
FACULTAD DE CIENCIAS  
ESCUELA DE FÍSICA  
BUCARAMANGA  
2024

**PROPIEDADES ELÉCTRICAS DE UNA IMPUREZA DONADORA CONFINADA  
EN DOS PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS DE  $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$**

LAURA MARCELA MONTAÑO VILLA

Trabajo de Grado para optar al título de  
Física

Director:

Ph.D. Willian Gutiérrez Niño

Codirector:

Ph.D Carlos José Páez González

UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER

FACULTAD DE CIENCIAS

ESCUELA DE FÍSICA

BUCARAMANGA

2024

## DEDICATORIA

A mi familia.  
Son el motor en mi vida.

## **AGRADECIMIENTOS**

Agradezco a mi madre, Simona, por apoyarme y acompañarme durante todo mi camino. A mi padre, Grateful, por darme la oportunidad de explorar lo que me gustaba con libertad. A mis hermanos, por sacarme sonrisas que motivaban mis días. A Harvi, Yolanda, Chelita y Lina por brindarme amor y comprensión. A todos mis amigos, gracias por brindarme su apoyo. A Felipe, gracias por su cariño y hacer ameno este viaje.

Una mención especial al profesor Willian Gutiérrez quien me ayudó incansablemente, tengo el placer de decir que tuve como director de tesis a alguien quien considero un verdadero maestro, en todos los sentidos. Al profesor Carlos Páez, quien me brindó apoyo durante todo el proceso y me motivó a tomar este camino de investigación con la forma de transmitir sus conocimientos. A ambos, gracias por no solo preocuparse por lo académico, son maravillosas personas.

A la Universidad Industrial de Santander por el apoyo que brindó para la realización de este trabajo de grado mediante el proyecto de investigación interno 3916, "PROPIEDADES ESPECTRALES DE CLÚSTERES REGULARES Y DESORDENADOS DE PUNTOS CUÁNTICOS SEMICONDUCTORES". Y a los profesores Iliia Mikhailov y Jairo Marín por sus valiosos aportes al mejoramiento de este trabajo.

Finalmente, me agradezco a mí, por no rendirme.

## CONTENIDO

	pág.
<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>13</b>
<b>1. MARCO TEÓRICO</b>	<b>17</b>
1.1. Puntos Cuánticos	17
1.1.1. Fabricación	19
1.2. Aproximaciones en el Estudio de Puntos Cuánticos	21
1.2.1. Aproximación de Masa Efectiva	22
<b>2. PUNTOS CUÁNTICOS DE <math>GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As</math></b>	<b>25</b>
2.1. MODELAMIENTO MATEMÁTICO DE UN QD DE $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$	25
2.1.1. Caso particular	29
2.2. MODELAMIENTO NUMÉRICO CON MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS	31
2.2.1. Método de elementos finitos	31
2.2.2. Comparación entre el modelado analítico y el modelado numérico	32
<b>3. MOLÉCULAS ARTIFICIALES DE <math>GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As</math> E INCORPORACIÓN DE IMPUREZAS</b>	<b>35</b>
3.1. PUNTOS CUÁNTICOS LATERALMENTE ACOPLADOS	35
3.1.1. MODELAMIENTO MATEMÁTICO	35
3.1.2. QDM SIN IMPUREZA DONADORA	36
3.1.3. QDM CON IMPUREZA DONADORA	40
3.1.4. QDM BAJO LA ACCIÓN DE UN CAMPO ELÉCTRICO CONSTANTE	46
<b>4. CONCLUSIONES</b>	<b>56</b>

<b>5. PUBLICACIONES Y EVENTOS</b>	<b>57</b>
<b>BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>58</b>
<b>ANEXOS</b>	<b>62</b>

## LISTA DE FIGURAS

	pág.
Figura 1. Densidad de estados en un punto cuántico, ilustrando cómo los estados energéticos en puntos cuánticos son altamente localizados, asemejándose a los estados en átomos, pero con la posibilidad de ajustar sus niveles energéticos mediante modificaciones en el tamaño y la composición de la nanoestructura. Tomado de: <sup>1</sup>	18
Figura 2. Ilustración del proceso de crecimiento en múltiples pasos para la formación de puntos cuánticos de GaAs/AlGaAs, mostrando cómo los nanohuecos se utilizan para controlar la estructura y propiedades de los puntos cuánticos. Tomado de: <sup>2</sup>	20
Figura 3. Esquema de vista superior de un sistema de un único QD de $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ .	26
Figura 4. Función asociada a la ecuación trascendente 15, para el número cuántico orbital $m = 0$ , cuyas raíces son los valores de energía requeridos por la función de onda 45.	28
Figura 5. Gráficas de algunas densidades de probabilidad radiales halladas mediante el método exacto.	30
Figura 6. Malla utilizada para el cálculo de los niveles de energía del punto cuántico de 30nm mediante elementos finitos.	33

---

<sup>1</sup> Paul Harrison. "Quantum Wires and Dots". En: *Quantum Wells, wires and dots*. John Wiley & Sons, 2001, 243–270.

<sup>2</sup> Lijuan Wang et al. "Self-Assembled Quantum Dot Molecules". en. En: *Advanced Materials* 21.25–26 (jul. de 2009), 2601–2618. DOI: 10.1002/adma.200803109.

- Figura 7. Comparación correspondientes a los primero seis niveles de energía para un QD de 30nm, con  $V_o = 40Ry^*$  (1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p), obtenidos mediante el método exacto en Mathematica y el método numérico en COMSOL Multiphysics. 34
- Figura 8. Esquema de vista superior de un sistema de SAQD con una impureza donadora en el centro del QD 2. 37
- Figura 9. Espectro de energías obtenido para puntos cuánticos de igual radio ( $r = 30\text{nm}$ ). Se listan los niveles de energía, junto con la identificación de los orbitales moleculares, enlazantes y antienlazantes. También se observan cruces en distintos puntos del espectro. 38
- Figura 10. Acercamiento al cruce de los niveles de energía c y d de la figura 9. Se proporcionan imágenes de la densidad de probabilidad de los estados con respecto a la distancia, mostrando un comportamiento típico de un cruce. 40
- Figura 11. Comparación entre los niveles de energía de las configuraciones de QDM sin (a) y con (b) impureza donadora, para QDs de tamaños idénticos (30nm). Las líneas moradas corresponden a niveles del QD con impureza. Las líneas punteadas sirven para diferenciar los niveles tipo s. 49
- Figura 12. Comparación entre los niveles de energía de las configuraciones de QDM sin (a) y con (b) impureza donadora para QDs con relación de radios  $r_2/r_1 = 2$ . Las líneas rosadas (moradas) corresponden al QD de mayor tamaño (que contiene la impureza). Las líneas punteadas señalan los estados tipo s. 50

- Figura 13. Densidades de probabilidad de los primeros cinco niveles de energía correspondientes a la estructura asimétrica  $r_2/r_1 = 2$  sin (a) y con (b) impureza donadora para distintas distancias entre los centros de los QD (d). 51
- Figura 14. Comparación entre el comportamiento de los niveles de energía de las configuraciones de QDM sin (a) y con (b) impureza donadora para una estructura con un QD que cambia su tamaño. El QD de tamaño fijo tiene  $r_1 = 60nm$  y el otro varía  $5nm < r_2 < 60nm$ . Las líneas moradas corresponden a niveles del sistema con impureza. 52
- Figura 15. Densidades de probabilidad de los primeros cinco niveles de energía correspondientes a la estructura asimétrica sin (a) y con (b) impureza donadora bajo un cambio en la relación entre los radios,  $r_1 = 60nm$ , a distancia entre centros constante  $d = (r_1 + r_2) * 0.95$ . 52
- Figura 16. Comparación entre el comportamiento de los niveles de energía de las configuraciones de QDM simétricas (a) y asimétricas (b) con variación en la posición de la impureza a lo largo del eje x. 53
- Figura 17. Comparación entre el comportamiento de los niveles de energía de las configuraciones de QDM simétrico sin (a) y con (b) impureza donadora ubicada en el centro del QD2 bajo la acción de un campo eléctrico en dirección x positiva, que varía entre  $-5[kV/cm]$  y  $7.5[kV/cm]$  54
- Figura 18. Comparación entre el comportamiento de los niveles de energía de las configuraciones de QDM asimétrico sin (a) y con (b) impureza donadora ubicada en el centro del QD2 bajo la acción de un campo eléctrico en dirección x positiva, que varía entre  $-5[kV/cm]$  y  $7.5[kV/cm]$  55

## ANEXOS

	<b>pág.</b>
Anexo A. Separación de variables para la ecuación de Schrödinger	62

## RESUMEN

**TÍTULO:** PROPIEDADES ELÉCTRICAS DE UNA IMPUREZA DONADORA CONFINADA EN DOS PUNTOS CUÁNTICOS DE AlGaAs/GaAs. \*

**AUTOR:** LAURA MARCELA MONTAÑO VILLA. \*\*

**PALABRAS CLAVE:** PUNTOS CUÁNTICOS, PROPIEDADES ELÉCTRICAS, IMPUREZA DONADORA, CAMPO ELÉCTRICO.

### **DESCRIPCIÓN:**

Se estudian las propiedades eléctricas de un electrón y una donadora confinados en dos puntos cuánticos acoplados lateralmente, en la presencia de un campo eléctrico uniforme, en el marco de la aproximación de masa efectiva y utilizando el método de elementos finitos. Esta estructura presenta un análogo de moléculas diatómicas homo- y hetero-nucleares. Se calcula el espectro de energía y las funciones de onda para diferentes distancias entre los puntos cuánticos, sus tamaños, las posiciones de la impureza, grados de asimetría de la estructura y las intensidades del campo eléctrico externo. Se presenta un análisis detallado de las modificaciones de los orbitales moleculares de los diferentes factores que favorecen o atenúan el acoplamiento cuántico entre los puntos. Resultados obtenidos evidencian la formación de estados moleculares en un sistema constituido por dos puntos cuánticos, tanto para un electrón como para una impureza donadora, y, en adición, revelan cómo el nivel de acople entre los puntos puede ser modulado por la posición de la impureza, la separación entre los puntos, el grado de asimetría de la estructura y la aplicación de un campo eléctrico externo. Además, se ha demostrado la posibilidad de inducir, mediante la aplicación de un campo eléctrico, una polarizabilidad eléctrica gigante en una impureza donadora confinada en puntos cuánticos acoplados lateralmente.

---

\* Trabajo de grado

\*\* Facultad de Ciencias. Escuela de Física.

## ABSTRACT

**TITLE:** ELECTRICAL PROPERTIES OF A CONFINED DONOR IMPURITY AT TWO QUANTUM DOTS OF AlGaAs/GaAs. \*

**AUTHOR:** LAURA MARCELA MONTAÑO VILLA \*\*

**KEYWORDS:** QUANTUM DOTS, ELECTRICAL PROPERTIES, DONOR IMPURITY, ELECTRIC FIELD.

### DESCRIPTION:

This study examines the electrical properties of an electron and a donor confined in two laterally coupled quantum dots, in the presence of a uniform electric field. It employs the effective mass approximation and the finite element method to investigate these properties. This structure exhibits properties analogous to those observed in homo- and hetero-nuclear diatomic molecules. The energy spectra and wave functions are calculated for a range of distances between the quantum dots, varying sizes, positions of impurities, degrees of structural asymmetry and external electric field strengths. A comprehensive examination of the impact of varying factors on the molecular orbitals, and the extent to which they influence the quantum coupling between the dots, is presented. The results obtained demonstrate the formation of molecular states in a system comprising two quantum dots, both for an electron and for a donor impurity. Additionally, they illustrate how the level of coupling between the dots can be modulated by the position of the impurity, the separation between the dots, the degree of asymmetry of the structure and the application of an external electric field. Moreover, it has been demonstrated that an electric field can be used to induce giant electric polarizability in a donor impurity confined in laterally coupled quantum dots.

---

\* Bachelor Thesis

\*\* Facultad de Ciencias. Escuela de Física.

## INTRODUCCIÓN

La física cuántica, especialmente en su comprensión a escalas subatómicas, desempeña un papel crucial en el avance de la tecnología moderna. Los puntos cuánticos, que recibieron reconocimiento global tras obtener el premio Nobel de química de 2023 por su innovador enfoque en la manipulación de propiedades electrónicas a nanoescala, son fundamentales en una amplia gama de aplicaciones tecnológicas. Estas estructuras nanométricas, fabricadas a partir de semiconductores, forman parte integral de diversos dispositivos tecnológicos.

El progreso en la comprensión de los fenómenos cuánticos ha marcado hitos importantes en la ciencia y la tecnología. La evolución en la fabricación de semiconductores, permitiendo la creación de estructuras cada vez más diminutas, una fase caracterizada por la miniaturización y la mejora de los dispositivos electrónicos. En este contexto, los puntos cuánticos son clave, no solo por su papel en los dispositivos electrónicos, sino también por su contribución a nuevas tecnologías y métodos de procesamiento de la información.

Las aplicaciones de los puntos cuánticos abarcan desde dispositivos de emisión

de luz, como los QD-LED<sup>1,2,3</sup>, hasta paneles solares más eficientes<sup>4,5,6</sup> y láseres con propiedades avanzadas<sup>7,8,9</sup>. Su rol en el ámbito de la computación cuántica es igualmente significativo<sup>10</sup>, particularmente en lo que respecta a las moléculas de puntos cuánticos, estructuras que representan un avance en la manipulación y control del espín electrónico y las interacciones cuánticas para el procesamiento y almacenamiento de información.

Estas moléculas de puntos cuánticos, consideradas análogas a los átomos artificiales, han abierto nuevas vías en la investigación de propiedades optoelectrónicas.

- 
- <sup>1</sup> Vanessa Wood y Vladimir Bulović. "Colloidal quantum dot light-emitting devices". En: *Nano reviews* 1.1 (2010), pág. 5202.
  - <sup>2</sup> Deniz Bozyigit, Olesya Yarema y Vanessa Wood. "Origins of Low Quantum Efficiencies in Quantum Dot LEDs". en. En: *Advanced Functional Materials* 23.24 (jun. de 2013), 3024–3029. DOI: 10.1002/adfm.201203191.
  - <sup>3</sup> Myoungjin Park et al. "All inkjet-printed 6.95 217 ppi active matrix QD-LED display with RGB Cd-free QDs in the top-emission device structure". En: *Journal of the Society for Information Display* 30.5 (2022), págs. 433-440.
  - <sup>4</sup> Vladimir M Aroutiounian et al. "Quantum dot solar cells". En: *Solar and Switching Materials*. Vol. 4458. SPIE. 2001, págs. 38-45.
  - <sup>5</sup> Graham H Carey et al. "Colloidal quantum dot solar cells". En: *Chemical reviews* 115.23 (2015), págs. 12732-12763.
  - <sup>6</sup> Zhenyu Yang et al. "Mixed-quantum-dot solar cells". En: *Nature communications* 8.1 (2017), pág. 1325.
  - <sup>7</sup> Justin C Norman et al. "A review of high-performance quantum dot lasers on silicon". En: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 55.2 (2019), págs. 1-11.
  - <sup>8</sup> D Bimberg et al. "InGaAs-GaAs quantum-dot lasers". En: *IEEE Journal of selected topics in quantum electronics* 3.2 (1997), págs. 196-205.
  - <sup>9</sup> Young-Shin Park et al. "Colloidal quantum dot lasers". En: *Nature Reviews Materials* 6.5 (2021), págs. 382-401.
  - <sup>10</sup> M Veldhorst et al. "An addressable quantum dot qubit with fault-tolerant control-fidelity". En: *Nature nanotechnology* 9.12 (2014), págs. 981-985.

cas<sup>11,12</sup>. Comprender el comportamiento de los puntos y moléculas cuánticas, especialmente aquellos fabricados con semiconductores y ocasionalmente semimetales<sup>13</sup>, es esencial. La diversidad en su forma y tamaño presenta desafíos en su modelado teórico debido a la anisotropía, asimetría e inhomogeneidad de estas estructuras.

Existen modelos teóricos que explican el comportamiento de los puntos cuánticos, variando según el material y la forma específica<sup>14,15</sup>. La investigación sobre el acoplamiento de puntos cuánticos se ha centrado principalmente en el acoplamiento vertical<sup>16,17,18</sup>, proporcionando así una base sólida para futuros avances en este campo emergente.

Este trabajo de investigación se propone desarrollar un modelo teórico numérico, utilizando la herramienta computacional COMSOL basada en la técnica de elementos finitos, para obtener las energías propias y las funciones propias de configuraciones

- 
- <sup>11</sup> Lijuan Wang et al. "Self-Assembled Quantum Dot Molecules". en. En: *Advanced Materials* 21.25–26 (jul. de 2009), 2601–2618. DOI: 10.1002/adma.200803109.
- <sup>12</sup> Shu-Shen Li et al. "InAs/GaAs single-electron quantum dot qubit". en. En: *Journal of Applied Physics* 90.12 (dic. de 2001), 6151–6155. DOI: 10.1063/1.1416855.
- <sup>13</sup> Mitchell Bacon, Siobhan J Bradley y Thomas Nann. "Graphene quantum dots". En: *Particle & Particle Systems Characterization* 31.4 (2014), págs. 415-428.
- <sup>14</sup> A Amtout et al. "Theoretical modeling and experimental characterization of InAs/ InGaAs quantum dots in a well detector". En: *Journal of applied physics* 96.7 (2004), págs. 3782-3786.
- <sup>15</sup> Frank Stern y Sankar Das Sarma. "Electron energy levels in GaAs- Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As heterojunctions". en. En: *Physical Review B* 30.2 (jul. de 1984), 840–848. DOI: 10.1103/PhysRevB.30.840.
- <sup>16</sup> Willian Gutiérrez, Jairo H Marin e Iliá D Mikhailov. "Charge transfer magnetoexciton formation at vertically coupled quantum dots". En: *Nanoscale research letters* 7 (2012), págs. 1-6.
- <sup>17</sup> Guido Burkard, Georg Seelig y Daniel Loss. "Spin interactions and switching in vertically tunnel-coupled quantum dots". En: *Physical Review B* 62.4 (2000), pág. 2581.
- <sup>18</sup> ID Mikhailov, LF García y Jairo Humberto Marín. "Vertically coupled quantum dots charged by exciton". En: *Microelectronics journal* 39.3-4 (2008), págs. 378-382.

de puntos cuánticos circulares lateralmente acoplados de AlGaAs/GaAs. El arseniuro de galio (GaAs) se ha destacado desde su descubrimiento como un semiconductor muypreciado, debido a su excelente desempeño en dispositivos eléctricos y electrónicos. Este material ha desarrollado toda una teoría de producción de dispositivos a su alrededor<sup>19</sup>, superando en eficiencia al silicio, uno de los mayores referentes en semiconductores. La producción de moléculas de puntos cuánticos de GaAs/AlGaAs se ha realizado desde hace algún tiempo<sup>20</sup>, así como su caracterización mediante técnicas experimentales como AFM o RMN. Sin embargo, no hay suficientes modelos teóricos alrededor de ellas.

Nos centramos en investigar cómo las variaciones en la configuración de los puntos cuánticos afectan sus propiedades energéticas y funciones de onda, y cómo estos modelos pueden predecir comportamientos en aplicaciones prácticas. Utilizaremos simulaciones computacionales avanzadas, especialmente la técnica de elementos finitos en COMSOL, para modelar las estructuras de puntos cuánticos y analizar sus propiedades físicas.

Este estudio busca llenar un vacío en la comprensión teórica de las moléculas de puntos cuánticos de  $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ . Al proporcionar modelos detallados, esperamos contribuir significativamente al desarrollo de tecnologías basadas en estos materiales y abrir nuevas avenidas para aplicaciones futuras en electrónica y fotónica.

---

<sup>19</sup> Michael S Shur. *GaAs devices and circuits*. Springer Science & Business Media, 2013.

<sup>20</sup> Wang et al., ver n. 11.

# 1. MARCO TEÓRICO

## 1.1. Puntos Cuánticos

Los puntos cuánticos (QD, por sus siglas en inglés) son nanoestructuras semiconductoras que presentan propiedades únicas debido a su confinamiento en dimensiones nanométricas. Estas características incluyen cambios significativos en sus atributos ópticos y eléctricos, así como en sus niveles de energía<sup>21</sup>. Un fenómeno comúnmente observado en heteroestructuras de dimensiones nanométricas es la capacidad de manipular la luz y la electricidad de maneras que no son posibles con los semiconductores en bloque, lo que los hace esenciales en aplicaciones como la fotónica y la optoelectrónica<sup>22</sup>.

La relación con un sistema de mecánica clásica se establece mediante la ecuación:

$$D - L = 3N \quad (1)$$

donde  $D$  representa la dimensión del sistema,  $L$  las restricciones, y  $N$  el número de partículas. En una nanoestructura con un solo electrón, considerando 3 dimensiones de movimiento, las dimensiones de confinamiento ( $D_c$ ) reemplazan las restricciones tradicionales, obteniéndose:

$$3 - D_c = G_l \quad (2)$$

donde  $G_l$  representa los grados de libertad. En este contexto, una nanoestructura n-

---

<sup>21</sup> Daniel Gammon. "Electrons in artificial atoms". En: *Nature* 405.6789 (2000), págs. 899-900.

<sup>22</sup> Paul Harrison. "Quantum Wires and Dots". En: *Quantum Wells, wires and dots*. John Wiley & Sons, 2001, 243-270.

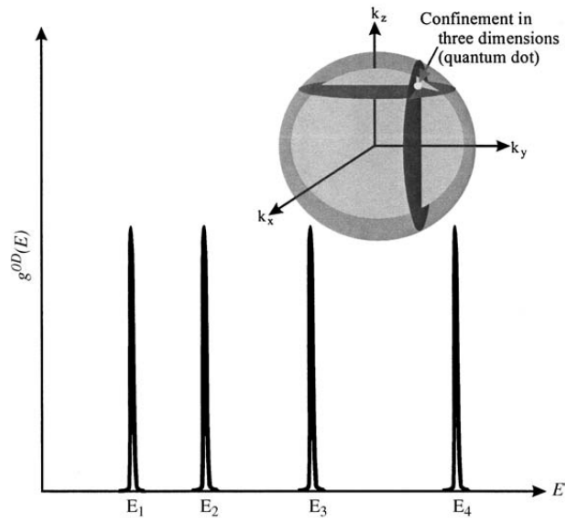


Figura 1. Densidad de estados en un punto cuántico, ilustrando cómo los estados energéticos en puntos cuánticos son altamente localizados, asemejándose a los estados en átomos, pero con la posibilidad de ajustar sus niveles energéticos mediante modificaciones en el tamaño y la composición de la nanoestructura. Tomado de:<sup>23</sup>

dimensional refiere al número de grados de libertad del electrón confinado. La tabla siguiente resume esta relación:

Tipo de nanoestructura	Dimensión de confinamiento	Grados de libertad
Bloque	0	3
Pozo	1	2
Cinta	2	1
Punto	3	0

Cuadro 1. Clasificación de las nanoestructuras según su dimensión de confinamiento y grados de libertad.

Los puntos cuánticos, al ser estructuras de dimensión cero, confinan un electrón o hueco en todas las direcciones. Su tamaño, similar a la longitud de onda de De Broglie de los portadores de carga, afecta directamente sus propiedades cuánticas. Esto permite fenómenos como la cuantización de la energía y el confinamiento de la función de onda, esenciales en su comportamiento y aplicaciones. Los niveles

de energía cuantizados en los puntos cuánticos se asemejan a los de un electrón en un átomo, justificando su denominación como *átomos artificiales*. A diferencia de los átomos reales, cuyos niveles de energía son fijos debido a su estructura electrónica, los niveles en los puntos cuánticos pueden ajustarse variando su tamaño y composición<sup>24</sup>.

**1.1.1. Fabricación** La fabricación de puntos cuánticos impacta directamente en su composición, tamaño y geometría, influyendo en sus propiedades ópticas y eléctricas. Cambios en el tamaño de los puntos cuánticos pueden alterar la longitud de onda de la luz que emiten o absorben, crucial para aplicaciones como sensores y dispositivos optoelectrónicos. Las técnicas de fabricación varían, enfocándose en puntos cuánticos autoacoplados (Self-Assembled Quantum Dots, SAQD), que son agrupaciones espontáneas de varios puntos cuánticos con propiedades colectivas que pueden diferir de puntos cuánticos individuales, ofreciendo ventajas en términos de uniformidad y eficiencia.

Las técnicas de crecimiento de los puntos cuánticos dependen del tipo de distribución deseada. Los métodos tradicionales raramente producen acoplamiento de puntos cuánticos, por lo que se requieren técnicas especializadas. Los puntos cuánticos pueden acoplarse tanto vertical como lateralmente, con un enfoque en estos últimos para este estudio.

**Epitaxia por haces moleculares (MBE)** La epitaxia por haces moleculares (MBE) es una técnica precisa y controlada para la obtención de puntos cuánticos, particularmente útil para crear puntos cuánticos de GaAs/AlGaAs con propiedades específicas. El MBE facilita un crecimiento por capas atómicas, permitiendo un control

---

<sup>24</sup> RC Ashoori. "Electrons in artificial atoms". En: *Nature* 379.6564 (1996), págs. 413-419.

detallado sobre el tamaño y la composición de los puntos cuánticos, factores claves en la determinación de sus propiedades ópticas y electrónicas. Este control es esencial para aplicaciones que requieren una uniformidad y precisión extremas en las características de los puntos cuánticos<sup>25</sup>.

En el proceso de MBE para crear puntos cuánticos de GaAs/AlGaAs, se inicia con una capa de puntos cuánticos de InAs. La aplicación de un gas de grabado, como  $AsBr_3$ , elimina los puntos cuánticos de InAs, dejando nanohuecos. El relleno de estos nanohuecos con  $Al_{0.45}Ga_{0.55}As$  forma la barrera inferior de la heterojuntura, determinando el potencial confinante para los portadores de carga. Posteriormente, se rellenan los huecos con GaAs y se aplican capas de AlGaAs con distintas concentraciones para formar la barrera superior. Este método, conocido como crecimiento en múltiples pasos, es crucial para lograr las características deseadas en los puntos cuánticos, como eficiencia cuántica y respuesta espectral<sup>26</sup>.

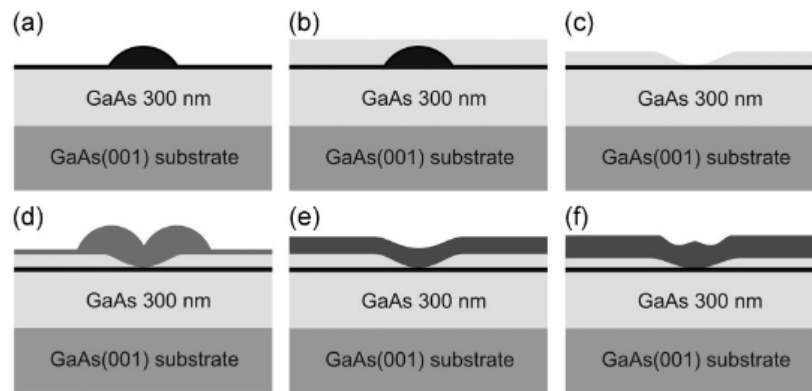


Figura 2. Ilustración del proceso de crecimiento en múltiples pasos para la formación de puntos cuánticos de GaAs/AlGaAs, mostrando cómo los nanohuecos se utilizan para controlar la estructura y propiedades de los puntos cuánticos. Tomado de:<sup>27</sup>

<sup>25</sup> Wang et al., ver n. 11.

<sup>26</sup> Wang et al., ver n. 11.

Además de su uso en la investigación básica, los puntos cuánticos de GaAs/AlGaAs tienen numerosas aplicaciones prácticas. Su capacidad para emitir y absorber luz en rangos específicos los hace ideales para su uso en dispositivos optoelectrónicos, como LEDs y láseres. Además, su sensibilidad a los cambios en el entorno los hace útiles en sensores y dispositivos de imagen. En la medicina, los puntos cuánticos se están explorando para aplicaciones en diagnóstico y terapia, aprovechando su capacidad para unirse a biomoléculas específicas y emitir luz en respuesta a estímulos específicos. La combinación de sus propiedades eléctricas, ópticas y químicas los convierte en una herramienta versátil en múltiples campos científicos y tecnológicos.

## **1.2. Aproximaciones en el Estudio de Puntos Cuánticos**

Los puntos cuánticos son nanoestructuras semiconductoras con propiedades únicas debidas a su confinamiento en dimensiones nanométricas. Estas propiedades requieren un enfoque especializado en su estudio, dada la complejidad de las variables involucradas.

La *aproximación de Born-Oppenheimer* o aproximación adiabática es fundamental en este contexto. Esta aproximación permite separar el análisis del movimiento de los núcleos, que son partículas pesadas, de los electrones, que son partículas ligeras. En los puntos cuánticos, esta separación es crucial para simplificar el estudio de la dinámica electrónica, ya que las interacciones entre electrones y núcleos son determinantes para sus propiedades electrónicas y ópticas.

Además, se utiliza la *aproximación de conducción*, que se centra en los electrones de conducción, los principales contribuyentes a las propiedades de conducción y ópticas de los puntos cuánticos. Esta aproximación es importante para comprender cómo estos electrones interactúan con campos externos y cómo afectan las propiedades eléctricas y ópticas de los puntos cuánticos.

En la aproximación de campo promedio, se considera que los electrones de conduc-

ción experimentan un potencial promedio  $V(\mathbf{r})$ , que es el resultado de promediar todas las interacciones en la red cristalina. Esta técnica es vital para simplificar el análisis del comportamiento electrónico de los puntos cuánticos.

La ecuación de Schrödinger, expresada como

$$\hat{H}\Phi = \left[ \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right] \Phi = E\Phi, \quad (3)$$

es esencial para determinar cómo los electrones ocupan estados cuánticos en puntos cuánticos bajo el potencial efectivo  $V(\mathbf{r})$ .

### 1.2.1. Aproximación de Masa Efectiva

**Concepto de Masa Efectiva** La masa efectiva de un electrón en un semiconductor, y por extensión en puntos cuánticos, es un concepto clave para comprender la respuesta de los electrones a campos externos. Esta masa, diferente de la de un electrón libre, se ve alterada por el potencial periódico del cristal. Esta alteración afecta directamente a propiedades como la movilidad electrónica y la conductividad del material. La energía de un electrón libre se puede describir como

$$E = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}. \quad (4)$$

Las relaciones entre la fuerza aplicada  $\mathbf{F}$ , la velocidad de grupo  $\mathbf{v}_g$ , y el cambio en el vector de onda  $\mathbf{k}$  son descritas por

$$\mathbf{v}_g = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E}{\partial \mathbf{k}}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \mathbf{k}}{\partial t} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{F}, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \mathbf{v}_g}{\partial t} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}^2} \mathbf{F}. \quad (7)$$

Cerca del mínimo de la primera banda de conducción, la energía se puede aproximar por

$$E(\mathbf{k}) \approx E(\mathbf{k}_o) + \frac{\hbar^2}{2m^*}(\mathbf{k}_o - \mathbf{k}), \quad (8)$$

donde  $E(\mathbf{k}_o)$  es la mínima energía. Así, se llega a la definición de la masa efectiva  $m^*$ :

$$m^* = \left( \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial \mathbf{k}^2} \right)^{-1}.$$

**Aproximación de Masa Efectiva y Función Envolvente** Además de las interacciones intrínsecas del cristal, es esencial considerar las fuerzas externas, como la presencia de impurezas superficiales donadoras. El potencial de atracción ejercido por el núcleo de la impureza sobre el electrón puede modelarse como un potencial de Coulomb  $U(\mathbf{r})$  apantallado por la constante dieléctrica del material. El Hamiltoniano del sistema, incluyendo este término adicional, se convierte en

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\mathbf{r}}. \quad (9)$$

Para abordar este sistema, se usan las funciones de Wannier  $a_n(\mathbf{r}; \mathbf{R}_i)$ , transformadas de Fourier de las funciones de Bloch, que describen el cristal en términos de vectores de la red en el espacio real. Estas funciones son útiles para tratar con estados localizados y representan orbitales atómicos en el caso de electrones altamente localizados. Las funciones de Wannier forman un conjunto completo y ortonormal y se relacionan con las funciones de Bloch de la siguiente manera:

$$a_n(\mathbf{r}; \mathbf{R}_i) = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i)} \Psi_{nk}(\mathbf{r}), \quad (10)$$

$$\Psi_{nk}(\mathbf{r}) = N^{-1/2} \sum_{\mathbf{k}} e^{(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i)} a_n(\mathbf{r}; \mathbf{R}_i). \quad (11)$$

Estas aproximaciones son fundamentales para el estudio y la comprensión de los puntos cuánticos, permitiendo una descripción más profunda de sus propiedades únicas y su comportamiento bajo distintas condiciones.

## 2. PUNTOS CUÁNTICOS DE $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$

El propósito de este capítulo es encontrar la solución exacta al problema de un electrón confinado en un punto cuántico (QD) circular con potencial de confinamiento finito y abrupto. Esto tiene como fin establecer un punto de referencia para evaluar el desempeño del método de elementos finitos que se usará en el caso de una molécula de puntos cuánticos.

### 2.1. MODELAMIENTO MATEMÁTICO DE UN QD DE $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$

Debido a la baja altura que presentan los QDs, se considera a estas estructuras como capas delgadas, lo que permite modelar el sistema de un QD de GaAs sobre AlGaAs como un sistema bidimensional. Asimismo, los QDs se asumen como círculos perfectos, lo que preserva la simetría angular en el caso de un único QD y rompe dicha simetría cuando se modela un sistema de dos QDs autoacoplados. Estos QDs tendrán tamaños mayores a varias celdas unitarias del material, por lo que se utiliza la aproximación de masa efectiva como un enfoque adecuado para el análisis.

El comportamiento de un electrón atrapado en el sistema de un único QD circular es descrito mediante la ecuación de Schrödinger (véase 1.2), dada por:

$$-\frac{\hbar}{2m^*}\nabla^2\psi + V\psi = E\psi. \quad (12)$$

Existen diferentes aproximaciones para el potencial de confinamiento experimenta-

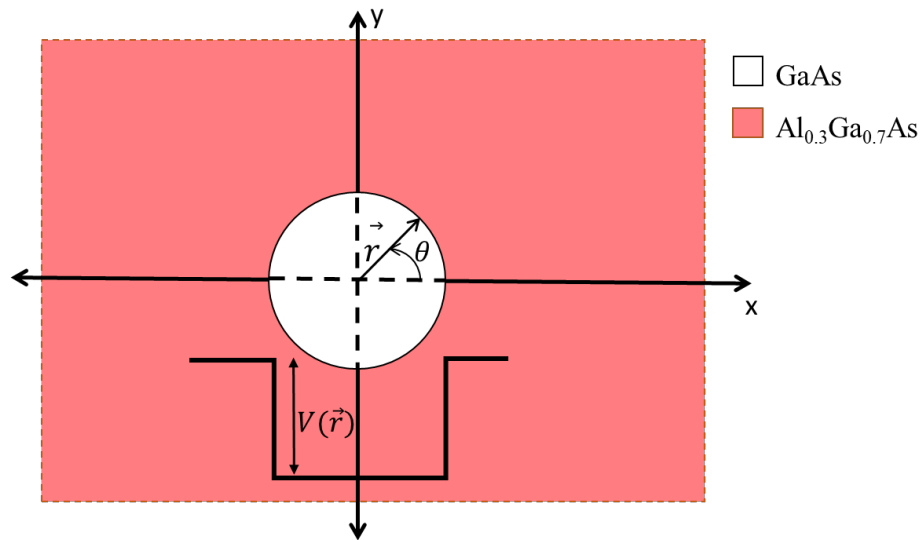


Figura 3. Esquema de vista superior de un sistema de un único QD de  $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ .

do por los portadores de carga en la estructura: parabólico<sup>28</sup>, gaussiano<sup>29</sup>, o pozos de potencial finitos. En este sistema se considera la diferencia entre el gap de energía entre el GaAs y el  $Al_xGa_{1-x}As$ , obteniendo un potencial de pozo con geometría circular:

$$V = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq R. \\ V_o, & r > R. \end{cases} \quad (13)$$

Aprovechando la simetría radial del sistema, el uso de coordenadas polares facilita el análisis y la solución de la ecuación, que se expresa ahora como:

<sup>28</sup> Weiming Que. "Excitons in quantum dots with parabolic confinement". en. En: *Physical Review B* 45.19 (mayo de 1992), 11036–11041. DOI: 10.1103/PhysRevB.45.11036.

<sup>29</sup> A. Gharaati y R. Khordad. "A new confinement potential in spherical quantum dots: Modified Gaussian potential". en. En: *Superlattices and Microstructures* 48.3 (sep. de 2010), 276–287. DOI: 10.1016/j.spmi.2010.06.014.

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right) \psi + V\psi = E\psi. \quad (14)$$

Esto naturalmente sugiere el uso de separación de variables como la forma más sencilla de abordar la ecuación. Así, al separar las variables, se obtienen dos ecuaciones conocidas: una para la parte angular, que resulta en una ecuación diferencial ordinaria de segundo orden con coeficientes constantes, y otra para la parte radial, que corresponde a una ecuación de Bessel. Sin embargo, al acoplar las soluciones internas y externas, surge un problema debido a la discontinuidad en el potencial: las soluciones angulares son idénticas para ambos casos, pero las radiales no. La parte interna se describe mediante la función de Bessel, mientras que la solución externa utiliza la función de Hankel. Esta diferencia da lugar a una ecuación trascendente sin solución analítica:

$$f(x) = \frac{\sqrt{x} J_{m+1}(r\sqrt{x})}{J_m(r\sqrt{x})} - \frac{\sqrt{V_0 - x} K_{m+1}(r\sqrt{V_0 - x})}{K_m(r\sqrt{V_0 - x})}. \quad (15)$$

Donde  $m$  es el número cuántico angular,  $V_0$  es el potencial fuera del QD,  $x$  representa el valor de energía a encontrar,  $J$  son las funciones de Bessel de primera clase y  $K$  son las funciones de Hankel. La ecuación está escrita en unidades adimensionales, y la energía está en Rydbergs efectivos del material. Al encontrar las raíces de la ecuación 15, se obtienen los valores de los niveles de energía del QD, como se muestra en 4. Para mayor detalle sobre el procedimiento, remitirse al anexo 1.

Las raíces de la ecuación 15 se determinan mediante el método de Newton-Raphson, permitiendo encontrar los valores de energía con los cuales se construye la función de onda  $\psi$ :

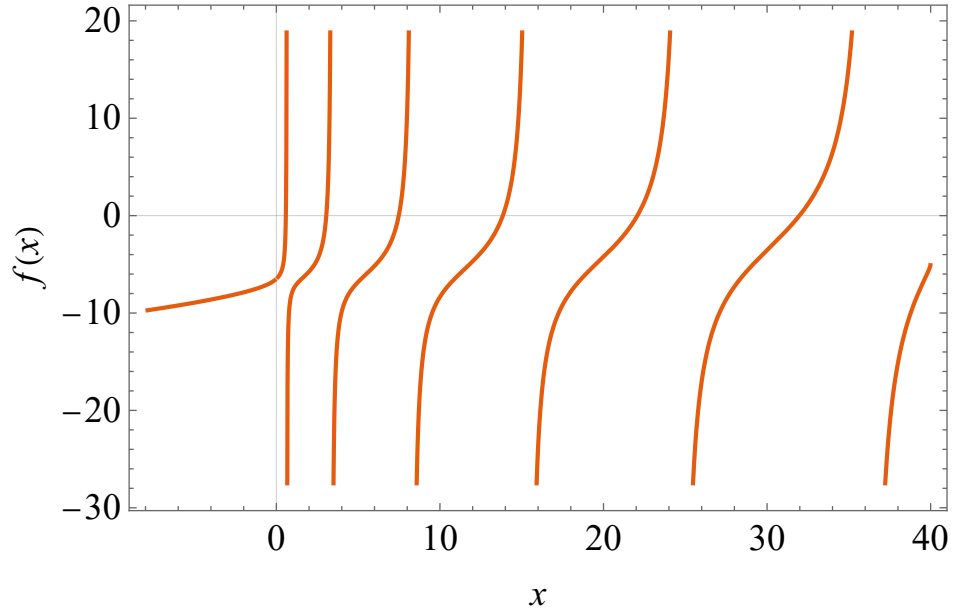


Figura 4. Función asociada a la ecuación trascendente 15, para el número cuántico orbital  $m = 0$ , cuyas raíces son los valores de energía requeridos por la función de onda 45.

$$\psi = \rho(r)\Phi(\phi), \quad (16)$$

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm im\phi}, \quad (17)$$

$$\rho(r) = \begin{cases} \rho_{in}(r) = C_n J_m(\sqrt{E}r), \\ \rho_{out}(r) = C_n C K_m(\sqrt{(V_0 - E)r}), \end{cases} \quad (18)$$

donde  $\rho_{in}$  es la solución radial dentro del QD,  $\rho_{out}$  es la solución radial fuera del QD, y  $\Phi$  es la solución angular. La constante  $C$  surge al aplicar las condiciones de frontera, y  $C_n$  es la constante de normalización, dada por:

$$C = \frac{J_m(\sqrt{E})}{K_m(\sqrt{V_0 - E})} \quad (19)$$

$$C_n = \frac{1}{\int_0^\infty \left[ J_m^2(\sqrt{E}r) + C^2 K_m^2(\sqrt{(V_0 - E)r}) \right] r dr} \quad (20)$$

**2.1.1. Caso particular** Se establecieron los valores de los parámetros físicos correspondientes al  $GaAs$ <sup>30</sup>, incluyendo la constante dieléctrica del GaAs,  $\epsilon = 12.35$ , y su masa efectiva,  $m_0^* = 0.067m_0$ . Para simplificar los cálculos, se utilizó un sistema de unidades adimensionales, definiendo el Rydberg efectivo ( $Ry^*$ ) y el radio de Bohr del GaAs ( $a_o^*$ ) de la siguiente manera:

$$a_o^* = \frac{4\pi\epsilon_o\epsilon\hbar^2}{e^2m_{GaAs}^*}, \quad (21)$$

$$Ry^* = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_o\epsilon a_o^*}. \quad (22)$$

Con esto se determinó que el valor del Rydberg para GaAs es  $1Ry^* \approx 5.544$  meV y el radio de Bohr es  $1a_o^* \approx 9.9$  nm. Para el  $Al_{0.35}Ga_{0.7}As$ , no se consideró la discontinuidad de las masas efectivas ni la constante dieléctrica, sino que solo se estableció la diferencia entre las brechas de energía, determinando que  $V_o = 40Ry^*$ . Como medida geométrica, se decidió que el QD tuviera un radio de  $R = 1a_o^*$ .

Usando técnicas basadas en el método de Newton y el método de la secante en *Wolfram Mathematica*, se obtuvieron los valores de energía para este caso particular, así como las funciones de onda correspondientes. La función asociada a la

---

<sup>30</sup> I. Vurgaftman, J. R. Meyer y L. R. Ram-Mohan. "Band parameters for III-V compound semiconductors and their alloys". en. En: *Journal of Applied Physics* 89.11 (jun. de 2001), 5815–5875. DOI: 10.1063/1.1368156.

ecuación trascendente para  $m = 0$  tiene dos raíces reales, correspondientes a los estados 1s y 2s, siguiendo la notación de átomos hidrogenoides. Para el estado base,  $E = 4.28Ry^*$ , y para el estado 2s,  $E = 21.94Ry^*$ . Usando la ecuación 45, se obtuvieron las funciones de onda para cada nivel. En la figura 5 se observan las densidades de probabilidad radial, con máximos en el centro del QD, y a medida que aumenta el número cuántico principal, también aumentan los máximos.

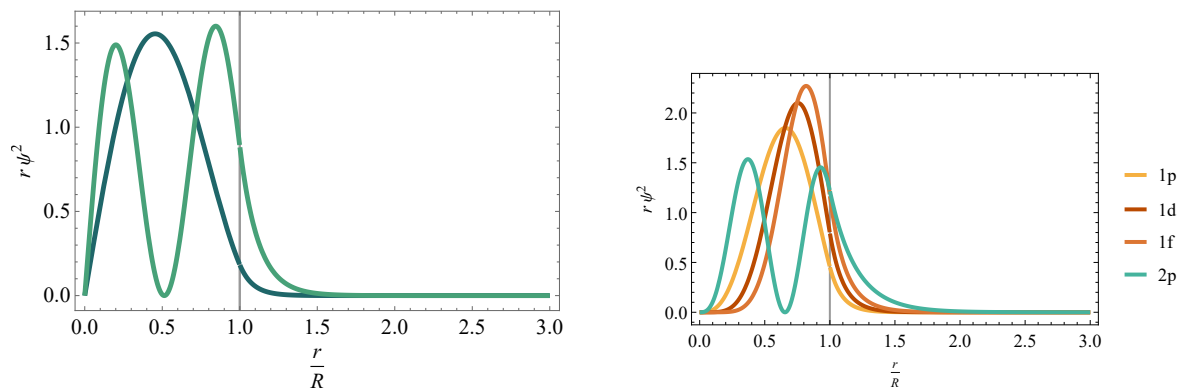


Figura 5. Gráficas de algunas densidades de probabilidad radiales halladas mediante el método exacto.

Al resolver la ecuación 15 para un número cuántico angular distinto de cero, se encontró que el comportamiento del QD difiere del de un átomo hidrogenoide natural. Al hallar las raíces para  $m = 1$ , los valores de energía obtenidos fueron  $E = 10.80Ry^*$  (valor más bajo) y  $E = 34.16Ry^*$  (valor más alto). El valor más bajo de energía es menor que el nivel 2s, lo que sugiere que se puede considerar un nivel 1p, donde la p indica el número cuántico angular, pero con el número cuántico principal 1. Este comportamiento se repite para  $m = 2$  y  $m = 3$ , dando lugar a los niveles 1d y 1f, representados en la figura 5(b).

Adicionalmente, se puede corroborar que en los niveles s, la cantidad de máximos corresponde al número cuántico principal. Sin embargo, el momento angular provoca una variación en la posición de los máximos. Como se observa en la figura 5(b), a medida que  $m$  aumenta, la posición del máximo en los estados 1p, 1d y 1f se aleja

del centro del QD; esto se debe a que el momento angular aporta más energía al electrón, lo que lo lleva a alejarse del centro.

La línea negra en las figuras 5 representa el borde del punto cuántico, es decir, donde está la frontera entre los materiales. Toda la porción de la función de onda que se encuentra más allá de esa línea se considera *longitud de penetración*. A mayor nivel de energía, esta porción aumenta. Esta característica será relevante en el estudio de puntos cuánticos acoplados, ya que sugiere que dos QDs que crezcan a unos pocos nanómetros de distancia entre sí podrían seguir funcionando como moléculas.

## **2.2. MODELAMIENTO NUMÉRICO CON MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS**

Se ha demostrado cómo el estudio teórico de un QD circular tiene una solución exacta a través de la ecuación trascendente. No obstante, a medida que el sistema se vuelve más complejo, obtener una solución analítica se vuelve más difícil. Por ello, se plantea el uso de métodos numéricos para modelar sistemas más complejos. El software *COMSOL Multiphysics®* es una herramienta de simulación de sistemas físicos basada en el método de elementos finitos (FEM)<sup>31</sup>, que se utiliza para resolver las ecuaciones diferenciales parciales que describen el sistema.

**2.2.1. Método de elementos finitos** En el método de elementos finitos se exploran varias aproximaciones: la aproximación directa, mediante álgebra matricial para problemas sencillos; la aproximación variacional, utilizando cálculo variacional para sistemas más complejos; y la aproximación de residuales, que es versátil y adecuada para una amplia gama de problemas físicos.

---

<sup>31</sup> COMSOL Multiphysics. "Introduction to comsol multiphysics®". En: *COMSOL Multiphysics, Burlington, MA, accessed Feb 9.2018 (1998)*, pág. 32.

**2.2.2. Comparación entre el modelado analítico y el modelado numérico** Para el modelado realizado en *COMSOL Multiphysics*, se empleó el módulo de ecuaciones diferenciales parciales, en el cual se implementó la solución de la ecuación de Schrödinger 14. Además del planteamiento en 2.1, se definió la discontinuidad de las masas efectivas entre los dos materiales. Se plantearon condiciones de frontera de Cauchy, asegurando que tanto la función de onda como su derivada sean continuas en la frontera de la heteroestructura, ya que la función de onda que describe al electrón debe ser físicamente bien definida en todos los puntos. El problema se reduce a dos ecuaciones. A continuación, se definió una malla fina para la aplicación del FEM, tal como se muestra en la figura 6, donde se observan las dos regiones definidas: QD y sustrato, ambas con una malla del mismo tamaño. El programa ajusta los elementos de la malla de manera que se adapten al contorno deseado, evitando transiciones bruscas que podrían causar errores en el cálculo. El tamaño de los elementos de la malla determina la precisión del cálculo, aunque es necesario equilibrar el rendimiento y la precisión del programa; dentro del QD se prefiere una malla más fina que en el sustrato, para obtener mayor precisión en el comportamiento del electrón. En este caso, se modeló un punto cuántico de 30nm, aproximadamente  $3a_0^*$ , ya que son recurrentes experimentalmente.

Se realizó una comparación entre los resultados obtenidos con el método exacto y el método numérico para garantizar que ambos presenten un comportamiento similar (véase fig. 7). Los valores representados corresponden solo a los primeros cuatro números angulares (s, p, d, f), aunque existen más niveles, no se considerarán en este estudio. Hay dos aspectos importantes que se destacan en esta comparación: primero, el valor del nivel base es prácticamente idéntico en ambos métodos; segundo, la diferencia entre los valores radica en pequeñas discrepancias entre los modelos, dado que el modelado numérico consideró la discontinuidad entre las masas efectivas de GaAs y AlGaAs, también conocida como las condiciones

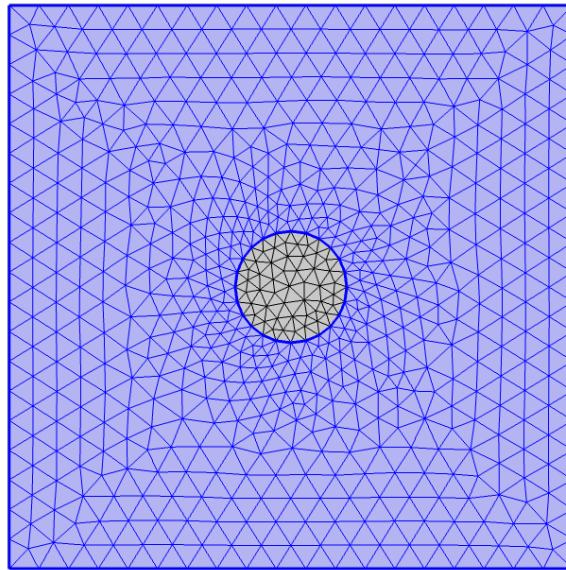


Figura 6. Malla utilizada para el cálculo de los niveles de energía del punto cuántico de 30nm mediante elementos finitos.

de BenDaniel-Duke<sup>32</sup>. Cabe señalar que los valores de energía obtenidos mediante el método numérico siempre estarán por encima de los obtenidos con el método exacto, debido a la naturaleza variacional del FEM.

---

<sup>32</sup> D. J. BenDaniel y C. B. Duke. "Space-Charge Effects on Electron Tunneling". en. En: *Physical Review* 152.2 (dic. de 1966), 683–692. DOI: 10.1103/PhysRev.152.683.

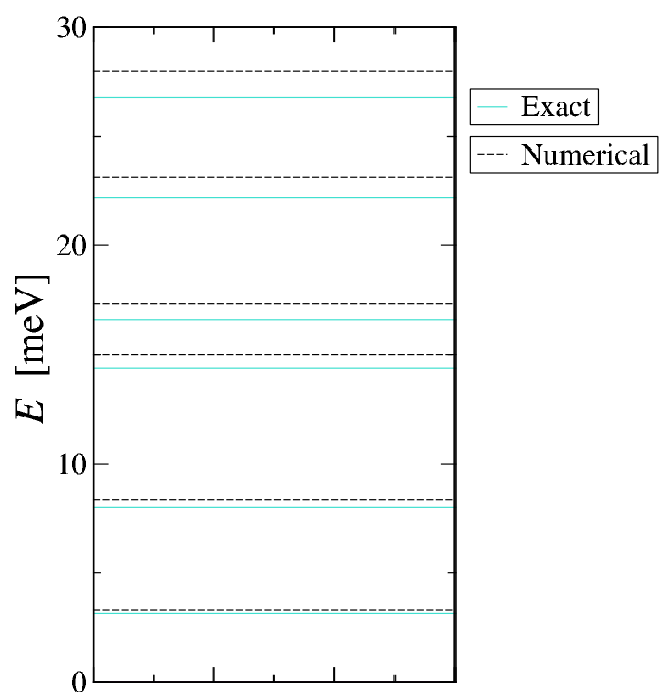


Figura 7. Comparación correspondientes a los primero seis niveles de energía para un QD de 30nm, con  $V_o = 40Ry^*$  (1s, 1p, 1d, 1f, 2s, 2p), obtenidos mediante el método exacto en Mathematica y el método numérico en COMSOL Multiphysics.

### 3. MOLÉCULAS ARTIFICIALES DE $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ E INCORPORACIÓN DE IMPUREZAS

El propósito de este capítulo es mostrar el comportamiento de dos puntos cuánticos lateralmente acoplados que recuerda a moléculas naturales. Los puntos cuánticos pueden crecer de muchas formas, sin embargo, en este trabajo nos enfocaremos en los puntos cuánticos con simetría circular, de manera que trabajaremos bajo el supuesto de que son perfectamente circulares. El radio de estos puntos cuánticos no tiene por qué ser iguales, entonces tomaremos a cada punto con radios independientes y exploraremos el efecto que la variación de la relación entre sus radios tiene sobre el espectro de energía de este sistema. Finalmente, estudiaremos el acoplamiento de los puntos, de manera que necesitaremos de variaciones entre las distancias que los separan. Todo esto considerando una impureza donadora en uno de los puntos.

#### 3.1. PUNTOS CUÁNTICOS LATERALMENTE ACOPLADOS

Como fue mencionado en el marco teórico, los QD pueden acoplarse de manera vertical o lateral dependiendo de la técnica de crecimiento que se utilice. Para los propósitos de este trabajo, se eligieron QD lateralmente acoplados. Cuando ocurre este acople se genera una llamada QDM (quantum dot molecule), la cual presenta estados moleculares parecidos a las moléculas naturales.

**3.1.1. MODELAMIENTO MATEMÁTICO** Se plantea un modelo matemático basado en el método de elementos finitos siguiendo la misma metodología que en 2.2, planteando la geometría en *COMSOL* y asignándole a cada sección la ecuación que le corresponde, teniendo en cuenta el desajuste de las masas efectivas del electrón

en el pozo y la barrera a través de las condiciones de BenDaniel-Duke. Adicionalmente, como se desean conocer las variaciones del comportamiento de los QD se realiza una serie de barridos paramétricos basados en las siguientes características:

- Distancia entre los QD.
- Tamaño de los QD.

En este proceso se toma en cuenta la influencia de una impureza donadora ubicada en uno de los QDs en el comportamiento de los niveles de energía de los SAQD, de manera que se añade un nuevo parámetro: **posición de la impureza**. La impureza donadora se representa en la forma de un potencial de Coulomb que se añade al Hamiltoniano del sistema,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \psi(r, \phi) \right) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(r, \phi) \right] + V\psi(r, \phi) - \frac{e}{4\pi\epsilon^*r} \psi(r, \phi) = E\psi(r, \phi). \quad (23)$$

Donde  $\epsilon^*$  corresponde a la constante dieléctrica del material, ya sea del GaAs o AlGaAs, dependiendo de la zona en la que se esté trabajando: QD o sustrato, respectivamente. Y el potencial está definido como,

$$V = \begin{cases} 0, & 0 \leq r \leq R. \\ V_o, & r > R. \end{cases} \quad (24)$$

En la figura 8 se puede ver gráficamente el modelado que fue aplicado al programa en *COMSOL*.

**3.1.2. QDM SIN IMPUREZA DONADORA** En primera instancia es necesario conocer el comportamiento de SAQD sin la influencia de la impureza donadora para establecer un punto de comparación, es así como se presenta el primer caso de

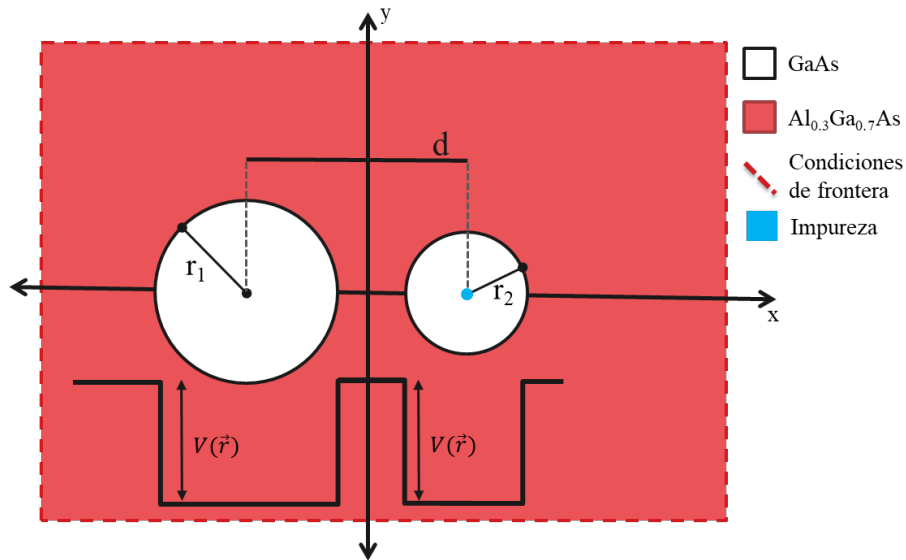


Figura 8. Esquema de vista superior de un sistema de SAQD con una impureza donadora en el centro del QD 2.

estudio: **SAQD con radios iguales** ( $r_1 = r_2 = 30nm$ ) **y sin impureza donadora**. El objetivo principal de este caso es determinar si los SAQD muestran estados moleculares y analizar demás comportamientos entre los primeros niveles de energía. Iniciamos con un barrido paramétrico de  $d$ , la distancia entre los centros de los QD, se puede observar en la figura 9. En un principio consideramos que los puntos están solapados, es decir, tenemos un solo punto, para este caso encontramos niveles de energía degenerados y peculiares. Los niveles de energía difieren de los niveles de energía del átomo de hidrógeno. Este átomo artificial cuanta con niveles 1p, 1d, 1f y más; no obstante, estados con número cuántico angular mayor a  $m = 3$  (tipo f) no serán analizados en este trabajo. El sistema cuenta con distintos tipos de simetrías: simetría axial, en el eje que une los centros de los puntos cuánticos; simetría circular, para el caso de un único QD; y simetría de reflexión, en la bisectriz de la línea que une los centros de los QDs. A medida que los puntos empiezan a separarse, observamos que se genera un rompimiento en la simetría circular del sistema, lo que provoca el rompimiento de la degeneración de los niveles de energía, y empe-

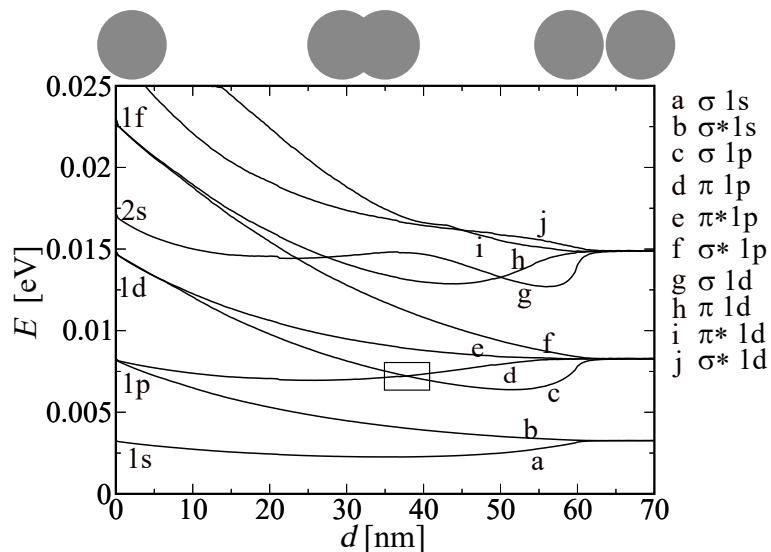


Figura 9. Espectro de energías obtenido para puntos cuánticos de igual radio ( $r = 30\text{nm}$ ). Se listan los niveles de energía, junto con la identificación de los orbitales moleculares, enlazantes y antienlazantes. También se observan cruces en distintos puntos del espectro.

zamos a notar orbitales moleculares causados por el solapamiento que hay entre los QDs. Estos estados, también se denominan términos electrónicos y pueden dividirse en enlazantes y antienlazantes (denominados con \*). Los estados enlazantes siempre son aquellos de menor energía, además, se caracterizan porque sus curvas tienen mínimos, que es un indicador de la estabilidad del estado, mientras que los estados antienlazantes no los tienen<sup>33</sup>. Sin embargo, a diferencia del una molécula natural, por la naturaleza rígida de este sistema de QDs, un estado antienlazante no separará la molécula, así, los estados antienlazantes ya no se pueden considerar inestables, ofreciendo configuraciones novedosas imposibles de alcanzar con moléculas naturales.

<sup>33</sup> Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu y Franck Laloë. "Application of the postulates to simple cases: spin 1/2 and two level systems". En: *Quantum Mechanics*. Wiley-VCH Verlag, 2020, 394–496.

Otro aspecto a destacar es que la simetría de reflexión, o simetría espejo, se mantiene a medida que los puntos se van alejando, lo cual es un indicador de que los términos electrónicos están doblemente degenerados y se pueden clasificar los estados de acuerdo a su paridad. Cuando al aplicar una reflexión respecto al eje de simetría la función de onda permanece inalterada, se considera un estado simétrico; en cambio, si la función de onda experimenta cambios, se clasifica como un estado antisimétrico.

Ahora, entre las cosas a detallar está que los niveles de energía empiezan y terminan en el mismo valor una vez se han desacoplados los QDs, esto dado que son sistemas equivalentes. La diferencia radica en que, cuando se han separado lo suficiente, los niveles aparecen doblemente degenerados, esto sucede porque ahora existen dos configuraciones con la misma probabilidad y la misma energía por nivel. Es importante destacar que esta degenerancia no se da exactamente en el punto cuando los QDs dejan de tocarse, sino unos nanómetros después de eso, reflejando que el electrón en esta estructura tiene la capacidad de tunelar, este comportamiento permitiría trabajar con QDs vecinos para formar enlaces moleculares.

Otra característica que tiene la figura 9 es el comportamiento de algunas curvas a juntarse en un mismo punto, formando un cruce. En el cruce, los estados orbitales cambian de configuración, un estado que venía siendo  $\pi$  se convierte en  $\sigma$ , este tipo de cruces pueden suceder debido a que los estados tienen simetrías diferentes. En este caso, el valor absoluto del momento angular de los estados orbitales,  $\Lambda$ , son completamente diferentes. Este tipo de intersección no es posible en términos de la misma simetría ya que los niveles se acercan y se repelen antes de cruzarse, este comportamiento no es solo típico de esta molécula, ni de la molécula de  $H_2$ , sino que es un teorema general de la mecánica cuántica<sup>34</sup>. En la figura 10 se puede apreciar

---

<sup>34</sup> E. M. Lifshitz L. D. Landau. "The Diatomic Molecule". En: *Course in Theoretical Physics: Quantum Mechanics*. Pergamon Press, 1991, págs. 300-355.

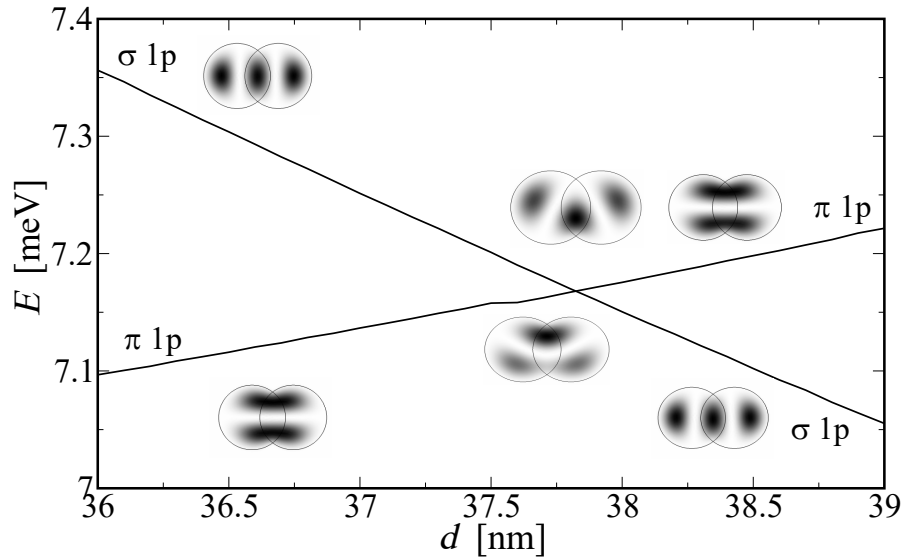


Figura 10. Acercamiento al cruce de los niveles de energía c y d de la figura 9. Se proporcionan imágenes de la densidad de probabilidad de los estados con respecto a la distancia, mostrando un comportamiento típico de un cruce.

de manera más detallada el comportamiento de estos cruces, con el ejemplo de los niveles de energía  $\pi 1p$  y  $\sigma 1p$ . Estos dos niveles empiezan a tener valores de energía muy cercanos, y al llegar a un valor aproximado de 38nm, caracterizados por tener exactamente la misma energía, justo después cambian el tipo de  $\Lambda$ , haciendo posible afirmar que esta interacción se trata de un cruce. El degeneramiento de los niveles de energía siempre está ligado a un tipo de simetría, en este caso, en el momento del cruce, las densidades de probabilidad del electrón son simétricas entre sí.

### 3.1.3. QDM CON IMPUREZA DONADORA

**QDs idénticos** Entramos a analizar el sistema anterior **SAQD con radios iguales** ( $r_1 = r_2 = 30nm$ ) considerando una impureza donadora ubicada en el centro de uno de los QDs. En las configuraciones anteriores, el potencial que confinaba

al electrón libre era de tipo *pozo de potencial*, sin embargo, ahora se encuentra un potencial de *tipo Coulomb* generado por la impureza. Esta adición genera que los niveles de energía mostrados anteriormente cambien drásticamente, disminuyendo los valores de energía de los orbitales y observando la aparición de un nivel de energía que está ligado al pozo coulombiano, como se observa en 11. Los niveles más bajos corresponden a densidades de probabilidad ubicados en el punto que contiene la impureza, la presencia de la impureza rompe la simetría de reflexión y como consecuencia, ya no se presenta el doble degeneramiento en los términos electrónicos. Una impureza, entonces, abre la posibilidad a tener sistemas de moléculas en las cuales se puede controlar la presencia del electrón en uno de los dos QDs. A diferencia del caso anterior, esta estructura tiende a retener al electrón en el QD donde está presente la impureza, disminuyendo la longitud de tunelamiento entre los QDs. Este comportamiento se ve reflejado, no solo en el caso de la impureza donadora, sino en todos los casos en los que los niveles de energía disminuyan. En la figura 11 se puede apreciar cómo el rompimiento de simetría también afecta a los cruces; como se mencionó anteriormente, los cruces están relacionados con la simetría, no obstante, la impureza donadora es un agente que rompe con las simetrías del sistema, evitando que se den algunos cruces y desplazando los que se mantienen. A su vez, es importante notar cómo la impureza afecta la organización de los niveles de energía, la distribución de los niveles de energía *sin* impureza es 1s, 1p, 1d, 2s; la distribución *con* impureza se vuelve 1s, 1p, 2s, 1d.

**QDs asimétricos** Se consideró un caso en el cual los QDs tuvieran diferentes tamaños, con una relación de radios  $r_2/r_1 = 2$  ( $r_1 = 30nm$ ), y sin considerar una impureza donadora. Como detalles generales, en la figura 12(a) se muestra cómo la energía de los términos atómicos disminuyó al tener un punto con mayor radio, esto en concordancia con el principio de incertidumbre: a mayor tamaño de confinamiento, menor es la energía que tendrá la partícula. Asimismo, la simetría de espejo

respecto al plano  $x = 0$  no está presente en la estructura, lo cual se ve reflejado en el no degeneramiento de los niveles de energía cuando ocurre el desacople de la QDM y en la pérdida de algunos cruces presentes en la figura 11, incluso sin considerar la impureza donadora. Finalmente, se observa cómo los niveles de energía se juntan entre ellos debido a que el confinamiento se ha hecho menor.

Continuando con detalles más específicos, llama la atención el comportamiento casi invariante del estado base durante la transformación el cual se debe a que, por ser el estado de menor energía, el electrón se mantendrá en el QD de mayor tamaño; el tipo de orbital también tiene que ver, al ser tipo  $s$  y, por lo tanto, circular, no favorece ninguna dirección y un cambio en la dirección  $x$  no lo afecta en gran manera. Un comportamiento diferente se da en el segundo nivel de la figura 12(a), este orbital tipo  $p$  está, en un inicio, degenerado por la simetría circular de la estructura ( $d < 30nm$ ). Como se aprecia en la figura 13(a), para distancias mayores a  $30nm$ , la simetría circular desaparece, desacoplando el nivel en dos y generando orbitales  $1p_x$  y  $1p_y$ . El orbital que tiene simetría en  $x$  se ajusta a la forma y los cambios en la estructura, descendiendo así la energía hasta un mínimo cuando la separación entre los QDs está alrededor de los  $70nm$ , lo cual indica que para esta configuración se tiene un mayor acople entre QDs. Por otro lado, en el nivel 3 de la figura 13(a) que inicialmente era  $1p_y$  se mantiene prácticamente invariable, pues su simetría no se relaciona con la transformación que se está llevando a cabo en dirección  $x$ . Un comportamiento realmente singular se evidencia en el nivel de energía siguiente, aquel de color negro, el cual mientras la estructura se mantiene siendo un único QD, es de tipo  $1d$ , pero cuando aparece el segundo QD y se rompe el degeneramiento de los niveles, el orbital desciende rápidamente hasta alcanzar un mínimo para luego crecer hasta configurarse como un orbital  $1s$ , pero ahora perteneciente al QD de menor tamaño (véase nivel 4 de la figura 13). Todos estos aspectos anteriormente descritos llevan a concluir que la asimetría de la estructura reduce el acople cuántico

en varios estados y por lo tanto dificulta la formación de estados moleculares.

Paralelamente, en la figura 12(b) se ve claramente la disminución en la energía de los términos electrónicos que genera la impureza donadora en el sistema, encontrando muchos más niveles de energía en un mismo rango de energía que en la estructura sin impureza. Si bien, el primer nivel de energía se mantuvo siendo *aproximadamente*  $-20\text{meV}$ , los demás niveles de energía son menores a los analizados en 3.1.3 y en 12(a), este detalle permite pensar en construir sistemas de QDM con impurezas a medida, dependiendo de los niveles de energía que se deseen obtener, algo imposible de realizar con moléculas naturales y vital en áreas tecnológicas actuales. Entre detalles más puntuales, se repite lo mismo que con la figura 11, la incorporación de la impureza modifica los cruces observados en el caso sin impureza, aunque este caso permite ver algunos que no se habían visto antes, por el rango de energía. Gracias a conocer las densidades de probabilidad (figura 13(b)) se puede evidenciar que la impureza donadora disminuye el acople entre los dos QDs, haciendo que el electrón tienda a estar en el QD que la contiene. Finalmente, se mantuvo el rasgo mencionado en 11, sobre el efecto de la impureza en la distribución de los niveles de energía, como se puede observar en la figura 13(b).

Con los resultados obtenidos en 12 surge la pregunta sobre el efecto que tiene la asimetría de la estructura sobre la formación de estado moleculares en una QDM de dos QD acoplados lateralmente. En la figura 14 se muestran los gráficos correspondientes a los niveles de energía más bajos de una QDM, con un único electrón (Figura a) o con una impureza donadora (Figura b), realizando un barrido paramétrico de  $r_1$  desde 5nm hasta 60nm, mientras que  $r_2$  se fijó en 60nm y se mantuvo un solapamiento del 5% de la distancia entre sus centros.

Para el caso del electrón se observa cómo la energía del estado base permanece prácticamente invariante durante toda la transformación debido a que el electrón va a preferir estar siempre en el QD de mayor tamaño y finalmente, cuando los QDs

tengan igual radio, se extenderá a toda la estructura mostrando un carácter enlazante (estado  $\sigma 1s$ ), como se detalla en la figura 15(a), y un pequeño descenso en la energía, el cual es imperceptible en la gráfica 14. El siguiente nivel corresponde a dos orbitales ( $1p_x, 1p_y$ ), el cual inicialmente está degenerado, pero a medida que  $r_2$  se incrementa ( $r_2 > 36nm$ ) ocurre el desacople de estos dos estados, el correspondiente al  $1p_x$  se acomoda a la forma de la estructura y su energía desciende a medida que  $r_2$  tiende a ser igual a  $r_1$ , para finalmente en el caso simétrico convertirse en un orbital antienlazante (estado  $\sigma^* 1s$ ); la figura 14(a) permite evidenciar gráficamente los caracteres enlazante y antienlazante observando la densidad de probabilidad que hay en el centro de los QDs. El orbital  $1p_y$  se mantiene invariante durante casi todo el barrido paramétrico, pero a medida que aumenta  $r_2$  y el orbital  $1p_x$  se transforma, este orbital lentamente toma su lugar como  $p_x$ . Es interesante ver como durante la transformación de la estructura aparecen cruces y anticruces entre niveles lo cual es evidencia del acople cuántico que va a darse para diferentes configuraciones entre niveles con diferente simetría (cruces) o entre niveles con igual simetría (anticruces).

Similarmente, para el caso de la impureza (figura 14(b)), el estado ligado al pozo de Coulomb inicia con un valor mayor al visto en los casos anteriores que va disminuyendo hasta que el radio toma un valor cercano al radio de Bohr del material y logra estabilizarse cuando la energía es aproximadamente  $-20meV$ . Las figuras 14 y 15 demuestran lo fuerte que es el potencial coulombiano para atraer el electrón, recordando que este tipo de potencial es infinitamente grande en el punto exacto donde está la impureza; en el caso de un punto cuántico muy pequeño, en este caso de  $5nm$ , el confinamiento es tan grande que hace que los niveles de energía estén muy por encima del rango de energía mostrado, sin embargo, la presencia de la impureza hace que, sin modificar el tamaño del punto, el nivel de energía baje drásticamente. Para esta estructura los cambios entre niveles son más pronunciados, como es el

caso del cuarto nivel de energía que venía siendo  $1p_y$  y llega a transformarse en  $2s$  (véase figura 15(b)). Lo mismo sucede con el quinto nivel de energía, que pasa de ser un estado perteneciente al QD izquierdo, tiene un vaivén entre los QDs y finalmente se establece en el QD derecho.

La figura 16 muestra la dependencia del espectro energético de una QDM en función de la posición de la impureza donadora que se mueve a lo largo del eje  $x$  de la estructura. El barrido empieza desde el extremo izquierdo del QD1 hasta el extremo derecho del QD2. La figura 16(a) corresponde al caso de QDs simétricos  $r_1 = r_2 = 30nm$ , con una separación entre centros de  $57nm$ , mientras que 16(b) presenta el caso de  $r_1 = 30nm$  y  $r_2 = 60nm$ , con una separación de  $85,5nm$  entre centros. Tanto para el caso simétrico como asimétrico se aprecia como el estado base, que corresponde al orbital  $1s$  del electrón, por el hecho de ser el que está más fuertemente ligado a la impureza es el nivel más sensible a la variación en la posición de esta, lo cual se hace evidente porque presenta los mayores cambios al comparar con los demás niveles mostrados, esto es aproximadamente  $15meV$ , mientras los demás niveles presentan variaciones menores a  $5meV$  a lo largo de todo el barrido. En el caso de los puntos simétricos, la impureza afectará la estructura de la misma manera independientemente de si está en el QD1 o QD2. Como era de esperar, el espectro de energía para el caso de QDs idénticos presenta simetría especular respecto al punto central de la estructura, mientras que para el caso asimétrico, el espectro energético también es asimétrico. En particular, para el caso simétrico, la energía correspondiente al estado base presenta mínimos cuando la impureza se localiza hacia la región central de los QDs, mientras que se observa un ligero incremento cuando la ubicación coincide con el centro de la QDM, zona donde la estructura presenta un estrangulamiento. Por último, se tiene un fuerte incremento en la energía cuando la impureza alcanza los extremos derecho e izquierdo de la estructura, pues es justo en estas posiciones cuando el confinamiento sobre el

electrón se hace mayor, ya que tiene que lidiar por un lado con la fuerte atracción Coulombiana que lo lleva a estar cerca de la impureza y por otro lado con la barrera de potencial estructural que solo le permite estar en una región muy limitada alrededor de la impureza, un comportamiento análogo a una reducción en el tamaño del QD, como en la figura 14. Un aspecto que merece resaltarse es cómo la presencia de la impureza en diferentes localizaciones propicia la transformación de orbitales debido a su poderosa influencia sobre el electrón, haciendo que algunos niveles descendan y otros asciendan, y por lo tanto favoreciendo la desaparición de cruces entre niveles.

**3.1.4. QDM BAJO LA ACCIÓN DE UN CAMPO ELÉCTRICO CONSTANTE** Los QDs se utilizan en entornos donde están expuestos a campos eléctricos constantemente, por lo que conocer el comportamiento de una estructura bajo la acción de un campo eléctrico resulta fundamental. Para esto, consideramos la acción de un potencial eléctrico ( $F$ ) en el Hamiltoniano del sistema,

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \left[ \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \psi(r, \phi) \right) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(r, \phi) \right] + \left[ V - \frac{e}{4\pi\epsilon^*r} - eFx \right] \psi(r, \phi) = E\psi(r, \phi). \quad (25)$$

A continuación, se presentan los espectros energéticos de dos QDs lateralmente acoplados simétricos y asimétricos, bajo la acción de un campo eléctrico que varía entre  $-5[kV/cm]$  y  $7.5[kV/cm]$  aplicado a lo largo del eje  $x$ . Para el caso simétrico observado en la figura 17, los QDs tienen  $r_1 = r_2 = 30nm$ , con una separación entre centros  $d = 30nm$ . En la figura 17(a) se muestra el comportamiento de un electrón confinado en la estructura, una primera característica que puede destacarse en estas curvas es que los niveles correspondientes a estados enlazantes decrecen con una pendiente mayor que los niveles correspondientes a estados antienlazantes, lo

cual puede atribuirse a la alta densidad de probabilidad que estos estados tienen en la región central de la QDM lo cual facilita el desplazamiento del electrón hacia el QD1 inducido por el campo eléctrico.

También se observa como el campo eléctrico puede producir cruces entre niveles con diferentes simetrías, por ejemplo, el segundo nivel correspondiente al estado antienlazante  $\sigma * 1s$  y el tercer nivel que corresponde al estado enlazante  $\sigma 1p$  van a cruzarse para un campo eléctrico de  $2kV/cm$ , esto se debe a la misma razón expuesta antes, el estado antienlazante  $\sigma * 1s$  al presentar un nodo en la región central de la QDM se opone inicialmente a dejarse arrastrar por el campo eléctrico hacia el QD1 y, por lo tanto, la energía asociada con este estado se mantiene casi invariante para campos menores a  $2kV/cm$ , de otra parte, el estado enlazante  $\sigma 1p$  reacciona ante la acción del campo con un rápido descenso en la energía, con lo cual se produce un intercambio entre niveles o un cruce de los mismos.

En la figura 17(b) se muestra el mismo caso anterior pero ahora con una impureza donadora localizada en el centro del QD2, lo cual rompe la simetría de la estructura y por lo tanto se refleja en el gráfico de energías vs campo eléctrico. Quizás el cambio más notable que se da por la presencia de la impureza, respecto al caso sin ella, es el comportamiento en la energía del estado base, el cual exhibe un cambio de pendiente abrupto cuando el campo eléctrico alcanza el valor de  $6kV/cm$ . Lo anterior es muestra de un incremento repentino que se da en el momento dipolar eléctrico del sistema debido al salto que da el electrón del QD2 al ser arrancado de la impureza por el campo eléctrico externo. Este último comportamiento puede resultar de gran interés a la hora de estudiar propiedades eléctricas y ópticas de este tipo de estructuras, porque representa una polarizabilidad gigante en la estructura.

La figura 18 muestra el comportamiento de la estructura asimétrica con  $r_1 = 30nm$  y  $r_2 = 60nm$ , una separación entre centros  $d = 45nm$ , al analizarse la acción del campo eléctrico en los QDs sin impureza se tiene como resultado la figura 18(a).

En este caso, la simetría no es conservada, pero es posible evidenciar cómo el electrón se desplaza desde el QD2 al QD1 a medida debido a la acción del campo eléctrico por las diferencias entre los valores iniciales a finales, cuando el electrón se establece en el QD de mayor tamaño, la energía es menor y viceversa. Otro punto a detallar es el cambio de tendencia que tienen los niveles dependiendo del punto en el que se concentra la densidad de probabilidad del electrón, las curvas son más pronunciadas para el QD de mayor tamaño, por tener un menor confinamiento. Al igual que en el caso simétrico, el campo induce cruces en el sistema.

Finalmente, se describe la influencia de una impureza donadora en la estructura asimétrica bajo la acción del campo eléctrico se presenta en la figura 18(b). En este punto vale la pena recalcar que, aunque pareciera que existe un cruce entre tres estados en un punto, realmente no lo es, como se muestra en el cuadro pequeño, los niveles están tan juntos que es necesario un gran zoom para apreciar el cruce y anticruce que se producen casi en el mismo punto. Adicionalmente, se repite el patrón de la estructura simétrica para el nivel base, con la diferencia de que ahora el momento dipolar puede volverse aún mayor debido a que puede acumular una mayor distancia entre las cargas. Este comportamiento puede tener aplicaciones importantes a la hora de escoger ciertos tipos de puntos para desarrollar proyectos que requieran cambios en los niveles de energía y, por ende, en la emisión de fotones bajo la influencia de un campo eléctrico.

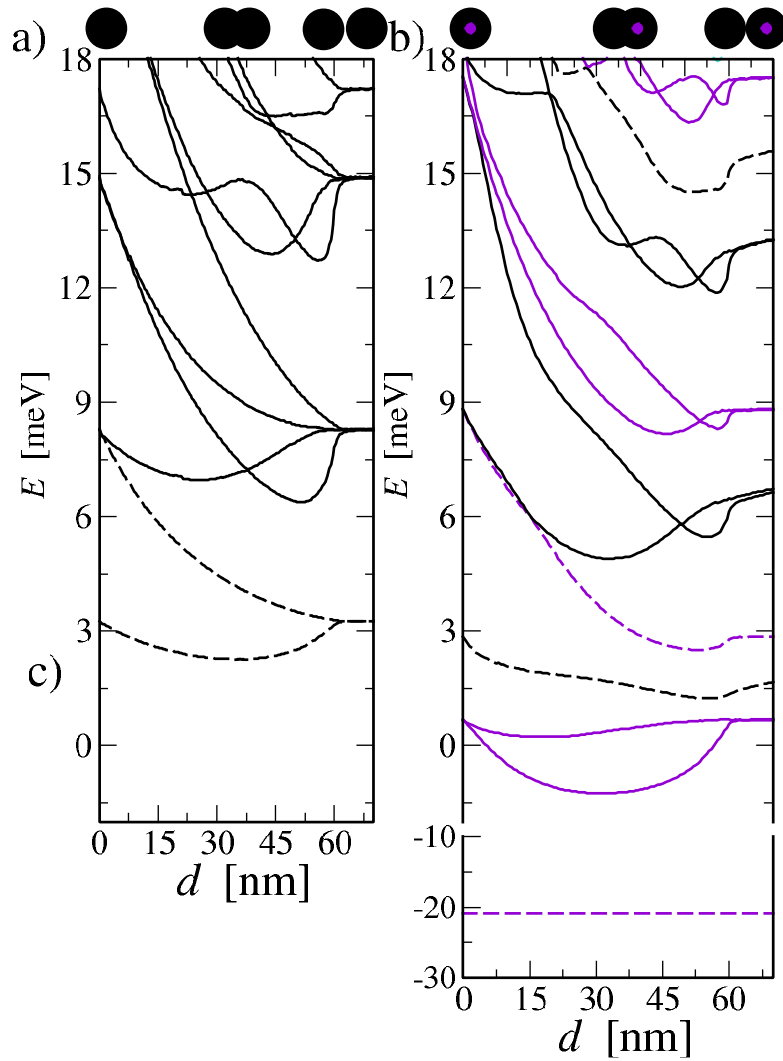


Figura 11. Comparación entre los niveles de energía de las configuraciones de QDM sin (a) y con (b) impureza donadora, para QDs de tamaños idénticos (30nm). Las líneas moradas corresponden a niveles del QD con impureza. Las líneas punteadas sirven para diferenciar los niveles tipo s.

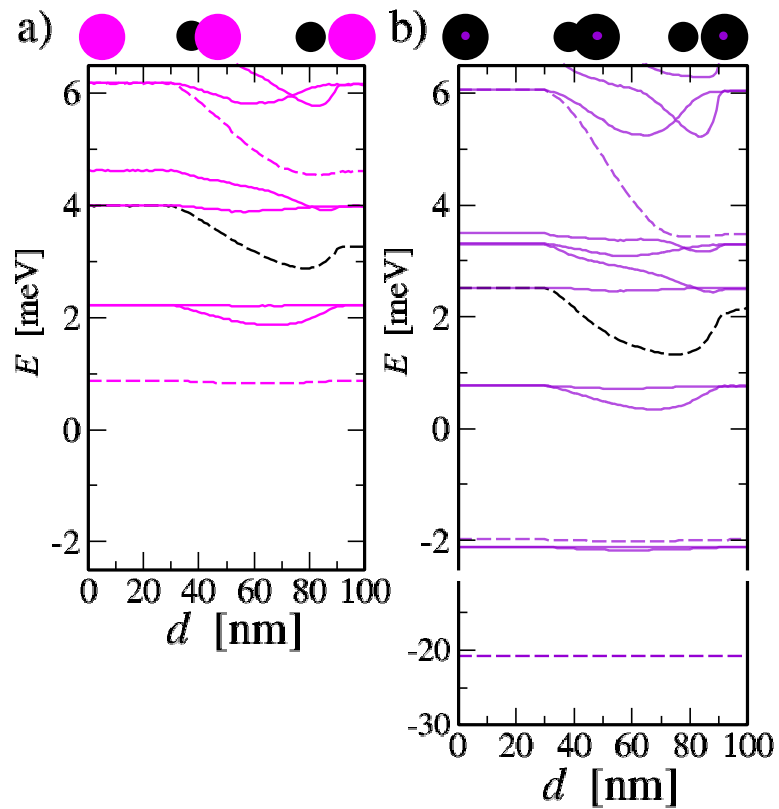


Figura 12. Comparación entre los niveles de energía de las configuraciones de QDM sin (a) y con (b) impureza donadora para QDs con relación de radios  $r_2/r_1 = 2$ . Las líneas rosadas (moradas) corresponden al QD de mayor tamaño (que contiene la impureza). Las líneas punteadas señalan los estados tipo s.

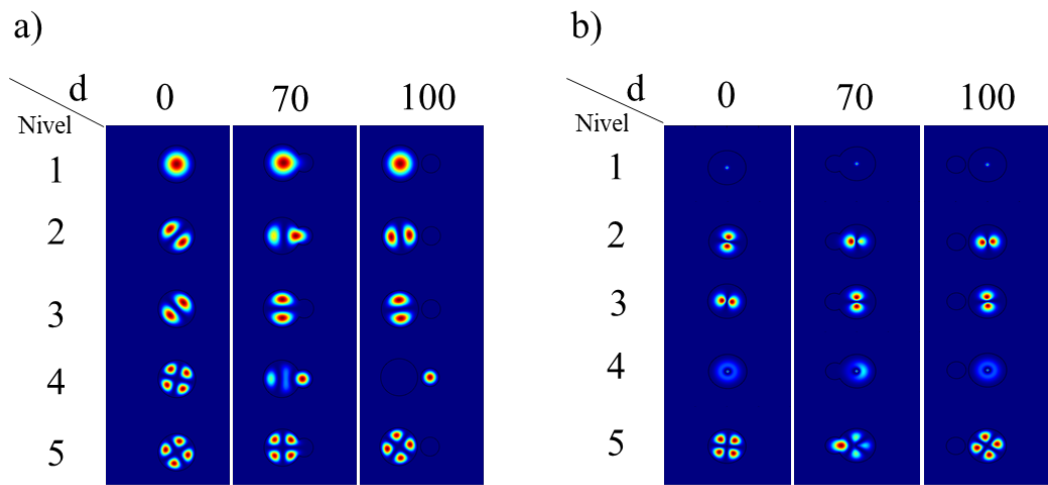


Figura 13. Densidades de probabilidad de los primeros cinco niveles de energía correspondientes a la estructura asimétrica  $r_2/r_1 = 2$  sin (a) y con (b) impureza donadora para distintas distancias entre los centros de los QD ( $d$ ).

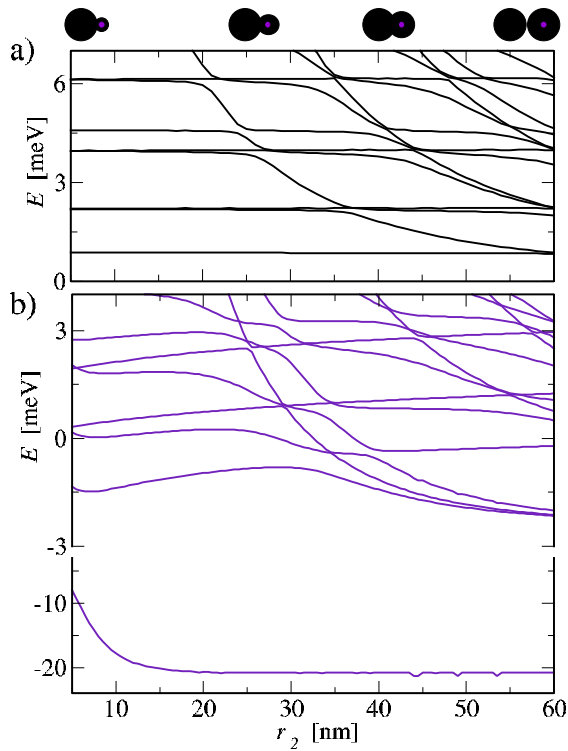


Figura 14. Comparación entre el comportamiento de los niveles de energía de las configuraciones de QDM sin (a) y con (b) impureza donadora para una estructura con un QD que cambia su tamaño. El QD de tamaño fijo tiene  $r_1 = 60nm$  y el otro varía  $5nm < r_2 < 60nm$ . Las líneas moradas corresponden a niveles del sistema con impureza.

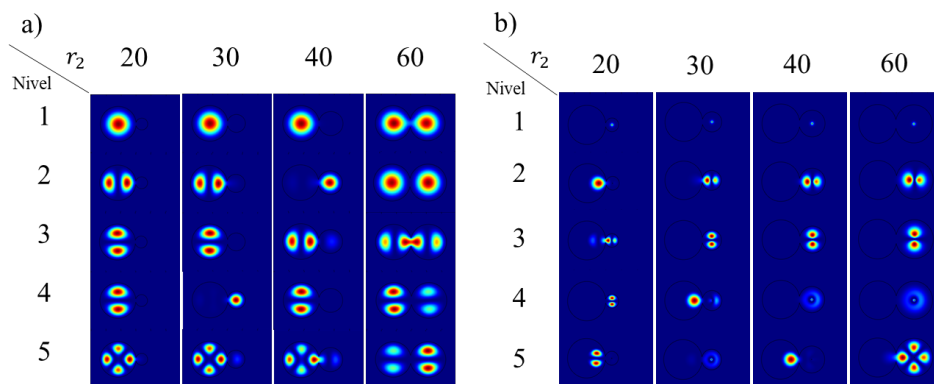


Figura 15. Densidades de probabilidad de los primeros cinco niveles de energía correspondientes a la estructura asimétrica sin (a) y con (b) impureza donadora bajo un cambio en la relación entre los radios,  $r_1 = 60nm$ , a distancia entre centros constante  $d = (r_1 + r_2) * 0.95$ .

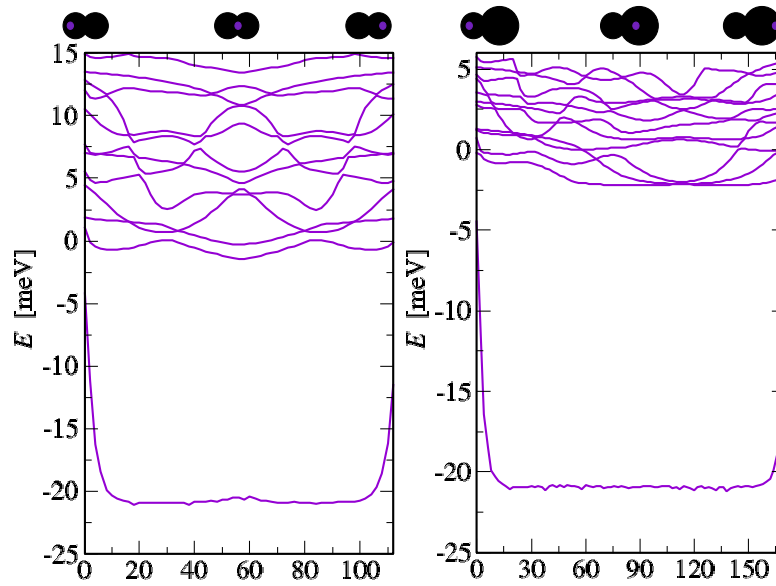


Figura 16. Comparación entre el comportamiento de los niveles de energía de las configuraciones de QDM simétricas (a) y asimétricas (b) con variación en la posición de la impureza a lo largo del eje  $x$ .

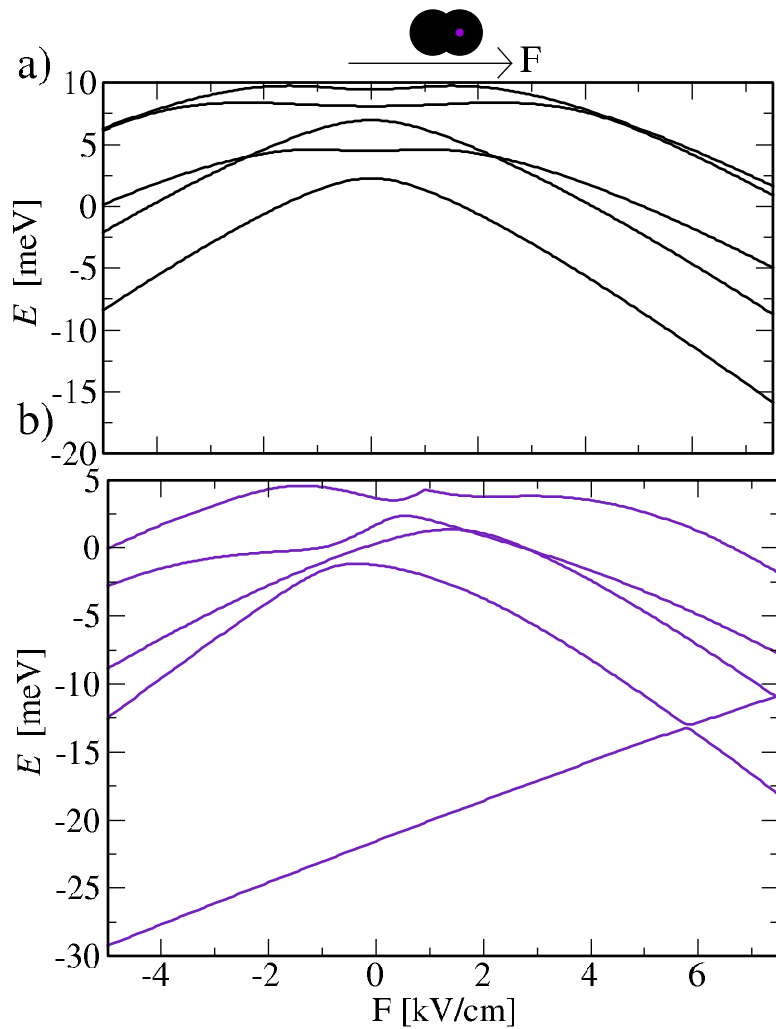


Figura 17. Comparación entre el comportamiento de los niveles de energía de las configuraciones de QDM simétrico sin (a) y con (b) impureza donadora ubicada en el centro del QD2 bajo la acción de un campo eléctrico en dirección  $x$  positiva, que varía entre  $-5[kV/cm]$  y  $7.5[kV/cm]$

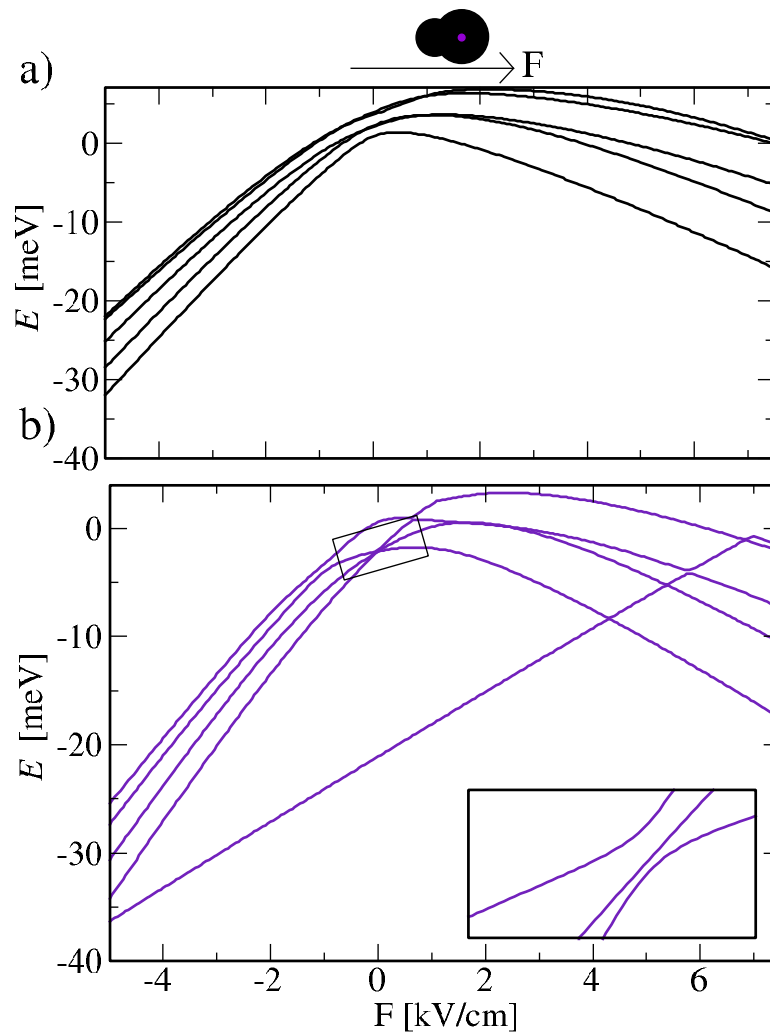


Figura 18. Comparación entre el comportamiento de los niveles de energía de las configuraciones de QDM asimétrico sin (a) y con (b) impureza donadora ubicada en el centro del QD2 bajo la acción de un campo eléctrico en dirección  $x$  positiva, que varía entre  $-5[kV/cm]$  y  $7.5[kV/cm]$

## 4. CONCLUSIONES

En forma sucinta, después de haber culminado el presente trabajo de investigación se pueden establecer las siguientes conclusiones:

- Se analizó una partícula en un pozo circular finito, facilitando la interpretación física de resultados numéricos y subrayando la importancia del estudio analítico previo.
- Se identificaron estados moleculares en dos puntos cuánticos acoplados de GaAs/Al<sub>0.3</sub>Ga<sub>0.7</sub>As, mostrando cómo el acople se modula por la posición de impurezas, separación, asimetría y campos eléctricos.
- Resultados sugieren un enfoque experimental usando el efecto Stark no lineal para detectar impurezas donadoras y asimetrías en sistemas de puntos cuánticos.
- Se encontró tunelamiento cuántico que permite acoplamiento entre puntos cuánticos separados por nanómetros.
- Se mostró que un campo eléctrico puede inducir una polarizabilidad gigante en sistemas con impurezas donadoras.

En conclusión, este trabajo no solo contribuye al campo de la materia condensada y los nanomateriales, sino que también plantea nuevas preguntas que invitan a la exploración continua de las moléculas de puntos cuánticos y sus propiedades optoelectrónicas. Con este estudio, esperamos despertar la curiosidad de la comunidad científica y motivar futuras investigaciones sobre estructuras de puntos cuánticos en diversas configuraciones.

## 5. PUBLICACIONES Y EVENTOS

Como resultado de esta investigación se expusieron los resultados en la modalidad de poster en los eventos internacionales:

- *31st International Materials Research Congress (IMRC 2023)* (Cancún, México - 2023)
- *32nd International Materials Research Congress (IMRC 2024)* (Cancún, México - 2024)

Y el evento nacional, en modalidad de ponencia oral:

- *VII Congreso de Ingeniería Física & II Applied Physics, Engineering and Innovation Conference* (Manizales, Colombia-2023)

Adicionalmente, los resultados están siendo sintetizados en un artículo para posteriormente ser publicados en una revista internacional indexada por parte de la autora de este trabajo.

## BIBLIOGRAFÍA

- Amtout, A et al. "Theoretical modeling and experimental characterization of InAs/InGaAs quantum dots in a well detector". En: *Journal of applied physics* 96.7 (2004), págs. 3782-3786 (vid. pág. 15).
- Aroutiounian, Vladimir M et al. "Quantum dot solar cells". En: *Solar and Switching Materials*. Vol. 4458. SPIE. 2001, págs. 38-45 (vid. pág. 14).
- Ashoori, RC. "Electrons in artificial atoms". En: *Nature* 379.6564 (1996), págs. 413-419 (vid. pág. 19).
- Bacon, Mitchell, Siobhan J Bradley y Thomas Nann. "Graphene quantum dots". En: *Particle & Particle Systems Characterization* 31.4 (2014), págs. 415-428 (vid. pág. 15).
- BenDaniel, D. J. y C. B. Duke. "Space-Charge Effects on Electron Tunneling". en. En: *Physical Review* 152.2 (dic. de 1966), 683–692. DOI: 10.1103/PhysRev.152.683 (vid. pág. 33).
- Bimberg, D et al. "InGaAs-GaAs quantum-dot lasers". En: *IEEE Journal of selected topics in quantum electronics* 3.2 (1997), págs. 196-205 (vid. pág. 14).
- Bozyigit, Deniz, Olesya Yarema y Vanessa Wood. "Origins of Low Quantum Efficiencies in Quantum Dot LEDs". en. En: *Advanced Functional Materials* 23.24 (jun. de 2013), 3024–3029. DOI: 10.1002/adfm.201203191 (vid. pág. 14).

- Burkard, Guido, Georg Seelig y Daniel Loss. "Spin interactions and switching in vertically tunnel-coupled quantum dots". En: *Physical Review B* 62.4 (2000), pág. 2581 (vid. pág. 15).
- Carey, Graham H et al. "Colloidal quantum dot solar cells". En: *Chemical reviews* 115.23 (2015), págs. 12732-12763 (vid. pág. 14).
- Cohen-Tannoudji, Claude, Bernard Diu y Franck Laloë. "Application of the postulates to simple cases: spin 1/2 and two level systems". En: *Quantum Mechanics*. Wiley-VCH Verlag, 2020, 394–496 (vid. pág. 38).
- Gammon, Daniel. "Electrons in artificial atoms". En: *Nature* 405.6789 (2000), págs. 899-900 (vid. pág. 17).
- Gharaati, A. y R. Khordad. "A new confinement potential in spherical quantum dots: Modified Gaussian potential". en. En: *Superlattices and Microstructures* 48.3 (sep. de 2010), 276–287. DOI: 10.1016/j.spmi.2010.06.014 (vid. pág. 26).
- Gutiérrez, Willian, Jairo H Marin e Ilia D Mikhailov. "Charge transfer magnetoexciton formation at vertically coupled quantum dots". En: *Nanoscale research letters* 7 (2012), págs. 1-6 (vid. pág. 15).
- Harrison, Paul. "Quantum Wires and Dots". En: *Quantum Wells, wires and dots*. John Wiley I& Sons, 2001, 243–270 (vid. pág. 17).
- L. D. Landau, E. M. Lifshitz. "The Diatomic Molecule". En: *Course in Theoretical Physics: Quantum Mechanics*. Pergamon Press, 1991, págs. 300-355 (vid. pág. 39).

- Li, Shu-Shen et al. "InAs/GaAs single-electron quantum dot qubit". en. En: *Journal of Applied Physics* 90.12 (dic. de 2001), 6151–6155. DOI: 10.1063/1.1416855 (vid. pág. 15).
- Mikhailov, ID, LF García y Jairo Humberto Marín. "Vertically coupled quantum dots charged by exciton". En: *Microelectronics journal* 39.3-4 (2008), págs. 378-382 (vid. pág. 15).
- Multiphysics, COMSOL. "Introduction to comsol multiphysics®". En: *COMSOL Multiphysics, Burlington, MA, accessed Feb 9.2018* (1998), pág. 32 (vid. pág. 31).
- Norman, Justin C et al. "A review of high-performance quantum dot lasers on silicon". En: *IEEE Journal of Quantum Electronics* 55.2 (2019), págs. 1-11 (vid. pág. 14).
- Park, Myoungjin et al. "All inkjet-printed 6.95 217 ppi active matrix QD-LED display with RGB Cd-free QDs in the top-emission device structure". En: *Journal of the Society for Information Display* 30.5 (2022), págs. 433-440 (vid. pág. 14).
- Park, Young-Shin et al. "Colloidal quantum dot lasers". En: *Nature Reviews Materials* 6.5 (2021), págs. 382-401 (vid. pág. 14).
- Que, Weiming. "Excitons in quantum dots with parabolic confinement". en. En: *Physical Review B* 45.19 (mayo de 1992), 11036–11041. DOI: 10.1103/PhysRevB.45.11036 (vid. pág. 26).
- Shur, Michael S. *GaAs devices and circuits*. Springer Science & Business Media, 2013 (vid. pág. 16).

- Stern, Frank y Sankar Das Sarma. “Electron energy levels in GaAs- Ga<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub>As heterojunctions”. en. En: *Physical Review B* 30.2 (jul. de 1984), 840–848. DOI: 10.1103/PhysRevB.30.840 (vid. pág. 15).
- Veldhorst, M et al. “An addressable quantum dot qubit with fault-tolerant control-fidelity”. En: *Nature nanotechnology* 9.12 (2014), págs. 981-985 (vid. pág. 14).
- Vurgaftman, I., J. R. Meyer y L. R. Ram-Mohan. “Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys”. en. En: *Journal of Applied Physics* 89.11 (jun. de 2001), 5815–5875. DOI: 10.1063/1.1368156 (vid. pág. 29).
- Wang, Lijuan et al. “Self-Assembled Quantum Dot Molecules”. en. En: *Advanced Materials* 21.25–26 (jul. de 2009), 2601–2618. DOI: 10.1002/adma.200803109 (vid. págs. 15, 16, 20).
- Wood, Vanessa y Vladimir Bulović. “Colloidal quantum dot light-emitting devices”. En: *Nano reviews* 1.1 (2010), pág. 5202 (vid. pág. 14).
- Yang, Zhenyu et al. “Mixed-quantum-dot solar cells”. En: *Nature communications* 8.1 (2017), pág. 1325 (vid. pág. 14).

## ANEXOS

### Anexo A. Separación de variables para la ecuación de Schrödinger

Al intentar solucionar la ecuación de Schrödinger para un electrón atrapado en un punto cuántico circular de GaAs sobre un sustrato de AlGaAs debemos considerar un punto muy importante, el tipo de geometría que posee el sistema. En este caso, la mejor forma de abordar este sistema es mediante el sistema coordenado polar, teniendo en cuenta que es trabajos en dos dimensiones a causa de la diminuta altura del punto cuántico en relación con el radio de su base. Así, tenemos la expresión,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \psi(r, \phi) \right) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(r, \phi) \right] + V\psi(r, \phi) = E\psi(r, \phi) \quad (26)$$

Debido a la forma del potencial y el hecho de que es una heteroestructura, la ecuación se divide en 2 ecuaciones que se deberán acoplar, una para la parte del sustrato y otra para la parte del punto cuántico,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \psi(r, \phi) \right) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(r, \phi) \right] = E\psi(r, \phi) \quad (27)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \psi(r, \phi) \right) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(r, \phi) \right] + V\psi(r, \phi) = E\psi(r, \phi) \quad (28)$$

Sin embargo, para facilitar el cálculo, no se considera la discontinuidad en las masas efectivas de los dos materiales, así podemos expresar estas ecuaciones de una manera más compacta, usando unidades adimensionales, por lo que cambiamos las unidades de longitud para basarnos en el radio de Bohr efectivo  $a_o^*$  para el GaAs y como medida de energía usamos el Rydberg efectivo  $Ry^*$  y así lograr obtener las ecuaciones,

$$\begin{aligned} \left[ \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \psi(r, \phi) \right) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(r, \phi) \right] + V_o \psi(r, \phi) &= E \psi(r, \phi) \quad r > R_o \\ \left[ \frac{1}{r} \left[ \frac{\partial}{\partial r} \left( r \frac{\partial}{\partial r} \psi(r, \phi) \right) \right] + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \psi(r, \phi) \right] &= E \psi(r, \phi) \quad r \leq R_o \end{aligned} \quad (29)$$

Para solucionar el problema basta con encontrar soluciones estáticas de las ecuaciones, así que el método de separación de variables se vuelve una alternativa viable. Planteamos una solución de la forma,

$$\psi(r, \phi) = \rho(r) \Phi(\phi) \quad (30)$$

Al hacer la separación de variables nos encontramos con

$$\frac{d}{dr} \left( r \frac{d\rho(r)}{dr} \right) + \left[ E - \frac{B^2}{r^2} \right] r \rho(r) = 0 \quad (31)$$

$$\frac{d}{dr} \left( r \frac{d\rho(r)}{dr} \right) + \left[ -(E - V_o) - \frac{D^2}{r^2} \right] r \rho(r) = 0 \quad (32)$$

$$\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = -B^2 \quad (33)$$

$$\frac{1}{\Phi(\phi)} \frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} = -D^2 \quad (34)$$

Las ecuaciones 31 y 32 corresponden a la parte radial dentro y fuera del punto cuántico, respectivamente. Tienen la forma de una ecuación de Bessel, 31 tiene las funciones de Bessel J y Y, mientras que 32 tiene de solución funciones de Hankel. Por otra parte, las ecuaciones 33 y 34 que corresponde a la parte angular tiene una respuesta conocida en forma de exponenciales.

$$\rho(r) = C_1 J_B(\sqrt{E}r) + C_2 Y_B(\sqrt{E}r) \quad (35)$$

$$\rho(r) = C_4 I_D(\sqrt{(V_0 - E)r}) + C_5 K_D(\sqrt{(V_0 - E)r}) \quad (36)$$

$$\Phi(\phi) = C_3 e^{\pm iB\phi} \quad (37)$$

$$\Phi(\phi) = C_6 e^{\pm iD\phi} \quad (38)$$

Ahora viene una parte crucial del problema, aplicar condiciones de frontera y con eso eliminar una buena cantidad de constantes y encontrar el valor de las otras:

1. La función correspondiente a la parte dentro del punto cuántico 35 no puede diverger en el origen, pues el resultado carecería de sentido físico  $\rightarrow C_2 = 0$ .
2. La función fuera del punto cuántico no puede diverger al infinito, no sería una función bien comportada  $\rightarrow C_4 = 0$ .
3. La función angular debe tener simetría angular ( $\Phi(0) = \Phi(2\pi)$ )  $\rightarrow B, D$  deben ser enteros.
4. Las funciones, al igual que sus derivadas deben ser iguales en la frontera  $\rightarrow r = R_o \quad B = D$ . EN la función radia podemos darnos la libertad de decir que  $C_1 = C_n$  y  $C_5 = C * C_n$ , donde  $C_n$  representa la constante de normalización y  $C$  representa la constante hallada al igualar las funciones.
5. La función debe ser normalizada.

Debido a la condición 4 se genera una ecuación trascendental, la relación generada en la parte radial y su derivada no es algebraica y debe ser resuelta de manera numérica para obtener una solución exacta a los valores de energía (E),

$$\frac{\sqrt{E}J_{B+1}(r\sqrt{E})}{J_B(r\sqrt{E})} = \frac{\sqrt{V_0 - E}K_{B+1}(r\sqrt{V_0 - E})}{K_B(r\sqrt{V_0 - E})}. \quad (39)$$

Después de hallar los valores e puede proceder a aplicar la técnica de normalización y hallar las constantes faltantes. Para la parte angular,

$$C_3 = C_6 = \frac{1}{2\pi}. \quad (40)$$

Para la parte radial normalizamos y encontramos,

$$C = \frac{J_B(\sqrt{E}R_o)}{K_m(\sqrt{(V_0 - E)R_o})}, \quad (41)$$

$$C_n = \frac{1}{\int_0^\infty [J_B^2(\sqrt{E}r) + CK_B^2(\sqrt{(V_0 - E)r})] r dr}. \quad (42)$$

Para finalmente obtener,

$$\psi = \rho(r)\Phi(\phi), \quad (43)$$

$$\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{\pm iB\phi}, \quad (44)$$

$$\rho(r) = \begin{cases} \rho_{in}(r) = C_n J_B(\sqrt{E}r), \\ \rho_{out}(r) = C_n C K_B(\sqrt{(V_0 - E)r}). \end{cases} \quad (45)$$