

**PROPIEDADES MAGNETOELÉCTRICAS DE PUNTOS CUÁNTICOS
ACOPLADOS LATERALMENTE**

CRISTIAN GERARDO NAVAS COLMENARES

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2020**

**PROPIEDADES MAGNETOELÉCTRICAS DE PUNTOS CUÁNTICOS
ACOPLADOS LATERALMENTE**

CRISTIAN GERARDO NAVAS COLMENARES

Trabajo de grado para optar al título de Físico

**Director:
LUÍS FRANCISCO GARCÍA RUSSI
PhD. en Física**

**UNIVERSIDAD INDUSTRIAL DE SANTANDER
FACULTAD DE CIENCIAS
ESCUELA DE FÍSICA
BUCARAMANGA
2020**

CONTENIDO

	Pág.
INTRODUCCIÓN	11
1. ESTADO DEL ARTE.....	16
2. MODELADO MATEMATICO DE PUNTOS CUÁNTICOS.....	24
2.1 MÉTODOS DE FABRICACIÓN DE PUNTOS CUÁNTICOS.....	24
2.2 MODELAMIENTO DE LA MORFOLOGÍA DE UN PUNTO CUÁNTICO AISLADO	27
2.3 MODELAMIENTO DE UN CLÚSTER DE QDS ACOPLADOS HORIZONTALMENTE	30
3. APROXIMACIÓN ADIABÁTICA.....	33
3.1 DESCRIPCIÓN APROXIMADA DE UNAS NANOESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS	33
3.2 MODELADO DE LOS PARÁMETROS DE UNA PELÍCULA DELGADA CON UN GROSOR VARIABLE	36
3.2.1 Variación de los parámetros de un material en las fronteras de QDs	37
3.2.2 Parámetros de aleaciones binarias y ternarias	39
3.2.3 Unidades adimensionales	40
3.3 ECUACIÓN DE ONDA PARA EL ELECTRÓN EN UNIDADES ADIMENSIONALES	41
3.4 SEPARACIÓN DE VARIABLES LA APROXIMACIÓN ADIABÁTICA	43
3.5 ANÁLISIS DEL MOVIMIENTO RÁPIDO EN LA DIRECCIÓN TRANSVERSAL.....	46

3.6 POTENCIAL ADIABÁTICO PARA EL MOVIMIENTO 2D EN EL PLANO HORIZONTAL	48
4. MOVIMIENTO LENTO EN EL PLANO DE UNA CAPA DELGADA	51
4.1 EL MÉTODO DE GALERKIN PARA LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER EN COORDENADAS POLARES	51
4.2 SEPARACIÓN DE COORDENADAS POLARES.....	54
4.3 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO	56
5. RESULTADOS Y DISCUSION	61
5.1 SIMULACIÓN DE LA MORFOLOGÍA Y PROCEDIMIENTO NUMÉRICO	61
5.2 EFECTO DE LA MORFOLOGÍA Y DE LA CLUSTERIZACIÓN	64
5.3 EFECTO DE ANISOTROPÍA.....	70
5.4 EFECTO DE CAMPÓ ELÉCTRICO.....	73
6. CONCLUSIONES	77
BIBLIOGRAFÍA.....	79

LISTA DE TABLAS

	Pág.
Tabla 1. Propiedades electrónicas para el GaAs y $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$	39

LISTA DE FIGURAS

	Pág.
Figura 1. Imágenes de $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ por la técnica AFM de (a) QDs, (b) QDs con forma de volcanes y (c) QR anillos cuánticos.	19
Figura 2. Representación digital del confinamiento de dos electrones dentro del sistema de puntos cuánticos cuádruples QQDs.....	22
Figura 3. Representación esquemática de los modos de crecimiento Frank-van der Merwe, Volmer-Wemer y Stranski-Krastanov en heteroepitaxia. ...	25
Figura 4. a) Ilustración del régimen de crecimiento pseudomórfico y (b) la posterior formación de nano-islas durante el modo de crecimiento Stransky-Krastanov.....	26
Figura 5. Digitalización de perfiles de un QD, un QR, un DCQR y un TCQR encontrados experimentalmente de los espectros de microscopía de fuerza atómica	28
Figura 6. Imágenes de QDs axialmente simétricos, derivados para los cortes de la Figura 5.	29
Figura 7. Imágenes de puntos cuánticos asimétricos con diferentes parámetros de la excentricidad	30
Figura 8. Imágenes 3D de dobletes de QDs obtenidos para los cortes de la Fig. 5	31
Figura 9. Imágenes 3D de cuartetos de QDs obtenidos para los cortes de la Fig. 5	32

Figura 10. Esquema de curvas de dispersión en las bandas de valencia y conducción.....	34
Figura 11. Representación esquemática de un corte a lo largo de eje X de un cuartete de QDs que puede considerarse como una película delgada de GaAs, de grosor variable y con un sustrato plano, sumergida en la matriz de Ga (Al)As	38
Figura 12. Representación esquemática del ancho de la película en comparación con su altura.....	45
Figura 13. La energía del estado base en función del grosor de una película delgada de GaAs/Ga _{0.7} Al _{0.3} As	49
Figura 14. Imágenes de potenciales adiabáticos para QDs singulares, dobletes y cuartetos con perfiles a) de una lente, b) un anillo singular, c) un anillo doble y d) un anillo triple.....	50
Figura 15. Curvas de funciones correspondientes a los potenciales radiales efectivos para diferentes estados rotacionales en un QR, en un doblete y en un cuartete.....	56
Figura 16. Perfiles de los cortes a lo largo de eje X de puntos cuánticos aislados axialmente simétricos con las morfologías de QD, QR, DCQR y TCQR escaneados experimentalmente (curvas a trazos) y perfiles aproximados mediante B-splines (curvas sólidas).....	62
Figura 17. Imágenes de capas delgadas con un solo QR y clústeres de dos y cuatro QRs, cuyas morfologías están definidas por la fórmula (41) con la función de corte ,.....	63

Figura 18. Energías de clústeres de dos QDs (a la izquierda) y cuatro QDs (a la derecha) en función del campo magnético.	65
Figura 19. Energías de clústeres de uno (a la izquierda), dos (en el centro) y cuatro (a la derecha) QRs (la fila superior), DCQR (la fila central) y TCQR (la fila inferior), en función de campo magnético.....	68
Figura 20. Lo mismo que en la figura 19 pero alargados en el eje X.	71
Figura 21. Apagamiento de las oscilaciones AB en presencia de campo eléctrico	74
Figura 22. Las energías de clústeres de dos (la fila superior) y cuatro (la fila inferior) QRs en la presencia (al lado izquierdo) y en ausencia (al lado derecho) de campo eléctrico	75

RESUMEN

TÍTULO: PROPIEDADES MAGNETOELÉCTRICAS DE PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS LATERALMENTE*

AUTOR: CRISTIAN GERARDO NAVAS COLMENARES**

PALABRAS CLAVE: MAGNETOELÉCTRICAS, PUNTOS CUÁNTICOS, MASA EFECTIVA.

DESCRIPCIÓN:

El progreso alcanzado recientemente en la fabricación de puntos cuánticos autoensamblados de tamaños nanométricos, depositados sobre un sustrato, abren nuevas posibilidades prometedoras en la miniaturización de los dispositivos micro- y opto-electrónicos. Los puntos cuánticos en el proceso de fabricación pueden agruparse en unos “clústeres”, formados por varios puntos cuánticos acoplados horizontalmente. En este trabajo de grado, se analizan los espectros de energía de puntos cuánticos semiconductores acoplados horizontalmente en los arreglos espacialmente asimétricos, y en la presencia de campos eléctricos y magnéticos externos.

El estudio se inicia con el análisis de efectos de variación de la morfología y de campos externos sobre el espectro energético de un electrón confinado en un punto cuántico aislado en las aproximaciones de masa efectiva y adiabática que permiten reducir el problema actual a una ecuación de Schrödinger para electrón confinado en un potencial bidimensional espacialmente asimétrico. Para solucionarla en el trabajo fue desarrollado un algoritmo y el software correspondiente basado en el uso del método de expansión en la serie de Fourier doble. La modelación del potencial confinamiento en el trabajo numérico se realizaron a partir de los escaneos experimentales publicados en literatura para estructuras con diferentes morfologías, cilíndricos, ovalados, anillos aislados y concéntricos.

Para extender la técnica numérica de análisis as los clústeres de puntos cuánticos en el trabajo se propuso un nuevo método de encapsulación y de diferentes transformaciones de tipo rotación, compresión y reflexión. La técnica desarrollada fue aplicada para analizar los espectros de los clústeres con dos y cuatro puntos cuánticos con diferentes perfiles: en forma de una lente, un anillo, un anillo con doble borde y un anillo con triple borde. Se presentan unos nuevos resultados que permitieron analizar la dependencia de los espectros energéticos, de los clústeres formados por estas estructuras, de sus características estructurales tales como, de la morfología, del tamaño, de la asimetría, de la separación entre de los puntos cuánticos, del número de puntos cuánticos en un clúster y además de los campos magnético y eléctrico externos. El análisis de los resultados obtenidos muestra una alta sensibilidad del espectro energético de los clústeres a la variación de todos estos factores.

* Trabajo de Grado.

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Luís Francisco García Rossi, PhD. en Física.

ABSTRACT

TITLE: MAGNETOELECTRIC PROPERTIES OF LATERALLY COUPLED QUANTUM DOTS*

AUTHOR: CRISTIAN GERARDO NAVAS COLMENARES**

KEYWORDS: MAGNETOELECTRIC, QUANTUM DOTS, EFECTIVE MASS.

DESCRIPTION:

Recently achieved progress in manufacture of self-assembled quantum dots of nanometric sizes deposited on a substrate opens new and promising possibilities in miniaturization of micro-and-optoelectronic devices. Quantum dots in the manufacturing process can be grouped in clusters formed by several horizontally coupled quantum dots. This graduation work analyzes the energy spectra of semiconductor quantum dots, horizontally coupled in spatially asymmetric arrangements, and in the presence of external electric and magnetic fields.

The study starts out with analysis of variation effects of morphology and external fields on the energetic spectrum of an electron confined in a quantum dot, isolated in the approximations of effective and adiabatic mass, that allow reduction of the current problem to a Schrödinger equation for electron confined in a spatially asymmetric bidimensional potential. So as to solve it in the study, an algorithm was developed, with the corresponding software based on the use of the expansion method in Fourier's double series. Modelling of potential confinement in the numeric work was conducted based on the experimental scans published in the literature for structures with different morphologies: cylindrical, oval, isolated and concentric rings.

In order to extend the numerical analysis technique to the quantum dot clusters in the study, a new method of encapsulation and of different rotation-compression-and-reflection-type transformations was proposed. The developed technique was applied to analyze the clusters spectra with two and four quantum dots with different profiles: lens-shaped, one ring, a double-rim ring, and a triple-rim ring. New results are shown that enabled analysis of the dependency on: energetic spectra, the clusters formed by these structures, their structural features, such as morphology, size, asymmetry, separation between the quantum dots, the number of quantum dots in a cluster, and also on the external magnetic and electric fields. Analysis of the results obtained shows high sensitivity of the energetic spectrum of the clusters to the variation of all of these factors.

* Degree work.

** Faculty of Sciences. School of Physics. Director: Luís Francisco García Rossi, PhD. in Physics.

INTRODUCCIÓN

En la década de los 70 del siglo pasado, se logró la fabricación de las primeras nanoestructuras denominadas superredes (SL) con periodicidad nanométrica¹. Este resultado experimental estuvo relacionado con el desarrollo de varias técnicas para el crecimiento de cristales. Posteriormente, hacia la década de los 80, se desarrollaron nuevas técnicas que condujeron al crecimiento de otras nanoestructuras, las cuales producen diferentes tipos de confinamiento de los portadores de carga, entre ellos pueden mencionarse: los pozos cuánticos (QWs), los hilos cuánticos (QWWs), los puntos cuánticos (QDs), sistemas cuasi dos-, uno y cero-dimensionales, respectivamente^{2,3,4}.

Los QDs han sido objeto de especial interés por diferentes grupos de investigación debido a que estas estructuras abren una amplia gama de posibilidades para modificar sus propiedades físicas mediante la variación de algunas condiciones durante su crecimiento, las cuales son importantes para aplicaciones tecnológicas en los diodos laser, transistores, compuertas lógicas, y también la posibilidad de utilizarlos en la computación cuántica^{5,6}. Estructuralmente, los QDs pueden ser considerados como pequeñas porciones de un material semiconductor, inmersas dentro de otro material semiconductor con parámetros diferentes. Sus morfologías, sus dimensiones y la composición química se pueden controlar en el proceso de

¹ ESAKI, I. and TSU, R. I. B. M. Int. Business Machines (IBM) J. Res. Develop, 1970, vol. 14, p. 61.

² HARRISON, Paul. Quantum wells, wires and dots. John Wiley & Sons, 2001.

³ BOWLER, D. R. Atomic-scale nanowires: Physical and electronic structure. Journal of Physics: Condensed Matter, 2004, vol. 16, no 24, p. R721.

⁴ JACAK, Lucjan; HAWRYLAK, Pawel; WOJS, Arkadiusz. Quantum dots. Springer Science & Business Media, 2013.

⁵ SUGIMOTO, Y.; IKEDA, N.; CARLSSON, N.; ASAKAWA, K.; KAWAI, N. & INOUE, K Light-propagation characteristics of Y-branch defect waveguides in AlGaAs-based air-bridge-type two-dimensional photonic crystal slabs. 2002. Vol. 27, Issue 6, pp. 388-390.

⁶ BIMBERG, D.; KIRSTAEDTER, N.; LEDENTSOV, N.; ALFEROV, Z.; KOPEV, P. S.; USTINOV, V. M. InAs–GaAs quantum pyramid lasers: in situ growth, radiative lifetimes and polarization properties. Japanese journal of applied physics, 1996, vol. 35, no 2S, p. 1311.

crecimiento utilizando diferentes técnicas de fabricación. Una de las técnicas que en los últimos años ha despertado mayor interés, es el método de Stranski-Krastanov⁷, porque permite fabricar los puntos cuánticos auto ensamblados (“Self-Assembled Quantum Dots – SAQDs”).

El interés principal del uso de los QDs en micro y opto-electrónica está relacionado con la capacidad de confinar en su interior los portadores de carga que interactúan mutuamente en solo algunos nanómetros de distancia entre ellos, por lo que su estructura electrónica resulta ser similar a la de un átomo, pero con un tamaño un poco aumentado. Esta es la razón por la que son llamados también “*átomos artificiales*”. Debido a la naturaleza espontánea del proceso de Stranski-Krastanov, estas pequeñas islas emergen de forma tal que sus posiciones y tamaños generalmente están aleatoriamente distribuidas sobre el sustrato. Con el ánimo de fabricar estructuras con un comportamiento predecible, que además presenten uniformidad en el tamaño y una distribución espacial regular, en los últimos cinco años, se ha elaborado un nuevo modo de crecimiento, conocido como epitaxia de gotas, el cual permite la formación de pequeños conglomerados de QDs espacialmente ordenados y de tamaños casi uniformes, denominados “*moléculas artificiales de puntos cuánticos*” (QDMs-Quantum Dots Molecules)^{8,9}.

Esta denominación se debe a que cuando dos o más QDs se hallan muy cerca uno del otro, los portadores de carga confinados en ellos, pueden tunelar hacia los puntos vecinos, debido al acople cuántico entre QDs, similar a lo que ocurre en algunas moléculas naturales donde los diferentes átomos constituyentes pueden

⁷ STANGL, Julian; HOLÝ, Václav; BAUER, Guenther. Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures. *Reviews of modern physics*, 2004, vol. 76, no 3, p. 725.

⁸ SANGUINETTI, Stefano; KOGUCHI, Noboyuki; MANO, Takaaki; KURODA, Takashi. Droplet Epitaxy Quantum Ring Structures. *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, Volume 6, Number 1, March 2011, pp. 34-50(17).

⁹ WU J.; WANG, Z.; LI, A. Z.; ZENG, Z.; LI. S. Formation of GaAs double rings through gallium migration and nanodrilling. *Journal of nanoelectronics and optoelectronics*, 2011, vol. 6, no 1, p. 58-61.

compartir uno o más electrones. Estas QDMs pueden presentar una amplia diversidad de arquitecturas como un par de puntos acoplados lateralmente¹⁰ o arreglos de cuatro puntos (QQDs, Quadra Quantum Dots), localizados cada uno en las esquinas de una celda cuadrada o rectangular¹¹, y algunas formas más exóticas, donde un punto central se halla rodeado por 2, 3 o 4 puntos satélites¹².

Los resultados experimentales muestran que es posible construir este sistema de puntos cuánticos cuádruples QQDs, los cuales podrían ser usados como un sistema de un cúbit o bit cuántico para formar una unidad celular autómatas básica (QCA, Quantum Cellular Automata). Esta es una de las razones para ampliar los estudios teóricos sobre las propiedades eléctricas, magnéticas y ópticas de clústeres de QDs, pues estos estudios permitirán facilitar la búsqueda de las estructuras óptimas para diferentes tipos de aplicaciones. Con este fin se puede utilizar la experiencia del grupo de Física Teórica de Materia Condensada de la UIS en esta área. En los últimos años el grupo ha publicado varios trabajos teóricos, en los cuales se han desarrollado varias técnicas numéricas para resolver la ecuación de Schrödinger^{13,14} para puntos cuánticos con diferentes morfologías, para un solo QD o un par de QDs acoplados horizontalmente con simetría axial y en la presencia de campos magnéticos y eléctricos.

En esta tesis se extienden los métodos elaborados anteriormente para uno y dos QDs para clústeres con un mayor número de puntos cuánticos. Se desarrollan los

¹⁰ WENSAUER, Andreas; STEFFENS, Oliver; SUHRKE, Michael and RÖSSLER, Ulrich. Laterally coupled few-electron quantum dots. *Physical Review B*, 2000, vol. 62, no 4, p. 2605.

¹¹ PANYAKEOW, Somsak. Quadra-Quantum Dots and Related Patterns of Quantum Dot Molecules: Basic Nanostructures for Quantum Dot Cellular Automata Application. *Cellular Automata T Innovative Modelling for Science and Engineering*, 2011, p. 95.

¹² BOONPENG, P.; JEVASUWAN, W.; SURAPRAPICH, S.; RATANATHAMMAPHAN, S., and PANYAKEOW, S. Quadra-quantum dots grown on quantum rings having square-shaped holes: Basic nanostructure for quantum dot cellular automata application. *Microelectronic Engineering*, 2009, vol. 86, no 4-6, p. 853-856.

¹³ GARCÍA, L. F.; REVINOVA, S. Yu; MIKHAILOV, I. D. Band nonparabolicity effect on spectral properties of quantum ring. *Superlattices and Microstructures*, 2017, vol. 103, p. 151-160.

¹⁴ GARCIA, L. F.; MARIN, J. H.; MIKHAILOV, I. D. Semi-empiric theory of electron-hole pair confined in thin GaAs/Ga (Al) As layer. *Physica B: Condensed Matter*, 2017, vol. 521, p. 84-92.

métodos numéricos para resolver la ecuación de Schrödinger para un electrón en un clúster de QDs y se presentan los resultados del cálculo de los niveles energéticos de diferentes estados electrónicos afectados por el enredo entre los puntos cuánticos adyacentes y los campos eléctricos y magnéticos externos. El método elaborado consiste de los tres siguientes pasos sucesivos. 1) Un algoritmo y un software que calcula el potencial adiabático del conjunto de puntos cuánticos en el marco de la aproximación de masa efectiva. En este paso se analiza el movimiento rápido del electrón en la dirección transversal del QD. 2) Un algoritmo y software que permite resolver la ecuación de Schrödinger 2D para el movimiento entre los puntos acoplados horizontalmente. El algoritmo es nuevo y presenta una combinación de los métodos de series de Fourier y de barrido trigonométrico. 3) Análisis de las dependencias de las energías en función de los campos magnético y eléctrico para QDs con diferentes morfologías, anisotropías y solapamientos.

Estos tres pasos fueron realizados en la tesis para puntos cuánticos de GaAs/AlAs en formas de una lente (QD), un anillo (QR), un anillo doble concéntrico (DCQR) y un anillo triple concéntrico (TCQR). Tomando los escaneos encontrados en los artículos publicados anteriormente para estas cuatro diferentes morfologías, en esta tesis se aplica el método propuesto para clústeres formados por puntos cuánticos de los cuatro tipos mencionados, para determinar el espectro energético de cada uno de ellos en función del campo magnético y se analizan las alteraciones que sufren estas dependencias en los procesos de clusterización y de cambio de simetría, en presencia del campo magnético. Los métodos propuestos en esta tesis y los resultados obtenidos son importantes para el estudio de las propiedades ópticas, eléctricas, magnéticas y magnetoeléctricas de los clústeres de QDs. Particularmente estos se pueden utilizar para analizar los momentos dipolares y las polarizabilidades eléctricas y magnéticas para clústeres de QDs con diferentes morfologías y tamaños.

Esta tesis se encuentra organizada de la siguiente manera. *En el segundo capítulo*, se describe brevemente las diferentes técnicas de crecimiento de los QDs, y de los clústeres de QDs y sus posibles aplicaciones. *En el tercer capítulo*, se describe el método numérico que se utiliza en la tesis par el modelamiento matemático de los clústeres de QDs, usando los datos experimentales para los perfiles escaneados de los puntos cuánticos fabricados. *El cuarto capítulo* contiene una explicación de las herramientas matemáticas para calcular el potencial adiabático de los puntos cuánticos acoplados horizontalmente en el marco de la aproximación de masa efectiva y se presentan como ejemplos las imágenes de estos potenciales bidimensionales calculados para las cuatro morfologías analizadas. *En el quinto capítulo*, se presenta el nuevo método numérico para resolver la ecuación de Schrödinger 2D correspondiente al movimiento electrón en el plano entre diferentes puntos cuánticos, el cual es una combinación de los métodos de Fourier y de barrido trigonométrico. *En el capítulo sexto*, se presentan los resultados del cálculo y finalmente, *en el capítulo siete*, se presentan las conclusiones.

1. ESTADO DEL ARTE

Las propiedades de los semiconductores dependen de los parámetros del material, tales como la composición, la constante de red, la constante dieléctrica, la constante magnética, la brecha entre las bandas de conducción y de valencia, las masas efectivas del electrón y del hueco, etc. A diferencia de un “*semiconductor en bloque*”, donde estos parámetros permanecen invariables dentro de todo el material, en las “*nanoestructuras semiconductoras*”, algunos de ellos o todos permanecen constantes solo dentro de regiones de escala nanométrica. En consecuencia, el movimiento de los portadores de carga en estos materiales queda restringido dentro de unas regiones cuyos tamaños son comparables con las longitudes de onda de Broglie. Este efecto se conoce como confinamiento cuántico¹⁵. Dependiendo del tipo de confinamiento, los diferentes sistemas de baja dimensionalidad se especifican como pozos cuánticos (QWs), Hilos cuánticos (QWWs) y puntos cuánticos (QDs)¹⁶. Estos últimos se fabrican con diferentes morfologías como lentes^{17, 18}, pirámides¹⁹ y pirámides truncadas²⁰, entre otras.

En el caso de los QWs, la región que presenta una homogeneidad de parámetros, es una capa de espesor nanométrica que logra confinar el movimiento de los portadores de carga en una región plana tal que su movimiento se restringe básicamente a dos dimensiones. Algunas técnicas han permitido sistemas con uno

¹⁵ GAMMON, Daniel. Electrons in artificial atoms. *Nature*, 2000, vol. 405, no 6789, p. 899-900.

¹⁶ HARRISON, Paul. Quantum wells, wires and dots. John Wiley & Sons, 2001.

¹⁷ LEONARD, D.; POND, K.; and PETROFF, P. M. Critical layer thickness for self-assembled InAs islands on GaAs. *Physical Review B*, 1994, vol. 50, no 16, p. 11687.

¹⁸ ZOU, J.; LIAO, X. Z.; COCKAYNE, D. J. H.; and LEON, R. Transmission electron microscopy study of In x Ga 1– x as quantum dots on a GaAs (001) substrate. *Physical Review B*, 1999, vol. 59, no 19, p. 12279.

¹⁹ GRUNDMANN, Marius; STIER, Oliver; BIMBERG, Dieter. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure. *Physical Review B*, 1995, vol. 52, no 16, p. 11969.

²⁰ FRY, P. W.; ITSKEVICH, I. E.; MOWBRAY, D. J.; SKOLNICK, M. S.; FINLEY, J. J.; BARKER, J. A... and HOPKINSON, M. Inverted electron-hole alignment in InAs-GaAs self-assembled quantum dots. *Physical review letters*, 2000, vol. 84, no 4, p. 733.

o dos grados de confinamiento adicional, los hilos cuánticos QWWs, sistemas cuasi unidimensionales y la situación extrema, corresponde a estructuras cuasi cero dimensionales, denominadas puntos cuánticos QDs.

Para fabricar estas nanoestructuras se utilizan materiales semiconductores compuestos, binarios o ternarios, lo que permite formar las heterojunturas por un cambio brusco de la concentración de uno de los componentes del compuesto. Se pueden mencionar algunos de los compuestos que se utilizan con este propósito: GaAs-AsIn, GaInAs-GaAlAs, In-GaInAs, InP-GaAs, GaSb-GaAs, InAs-Si, InSb-CdTe, etc. Dichos materiales se eligen esencialmente por presentar dos aspectos de gran importancia para el diseño de nanoestructuras: diferentes anchos de banda prohibida y parámetros de red muy parecidos.

Los métodos para crear nanoestructuras semiconductoras se pueden dividir en dos clases, una que se denomina “*top-down*” y la otra “*botton-up*”. La técnica “*top-down*” se utiliza para crear estructuras a partir del tallado del material, implicando por ejemplo procesos de litografía en base a rayos electrónicos y grabado. La técnica “*botton-up*” se basa en el auto ensamblado epitaxial o el crecimiento auto organizado con el fin de una organización estructural de los átomos. Esta clase de métodos implican procesos heteroepitaxiales tales como: Deposición molecular epitaxial (MBE); Deposición química metal-orgánica en la fase de vapor (MOCVD)²¹ y epitaxia de fase líquida²².

Las nanoestructuras semiconductoras que presentan mayor interés debido a sus aplicaciones son los QDs, también llamados átomos artificiales. Los QDs despliegan una diversa gama de propiedades, por un lado, ofrecen un largo espectro de

²¹ DAVIES, John H. *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*. Cambridge university press, 1998.

²² HORNISCHER, W.; GRAMBOW, P.; DEMEL, T.; BAUSER, E.; HEITMANN, D.; VON KLITZING, K.; and PLOOG, K. Quantum wires prepared by liquid-phase-epitaxial overgrowth of dry-etched AlGaAs-GaAs heterostructures. *Applied physics letters*, 1992, vol. 60, no 24, p. 2998-3000.

posibilidades que permite el diseño de dispositivos opto electrónicos y, por otro lado, presentan un gran interés en la exploración y el estudio de fenómenos físicos.

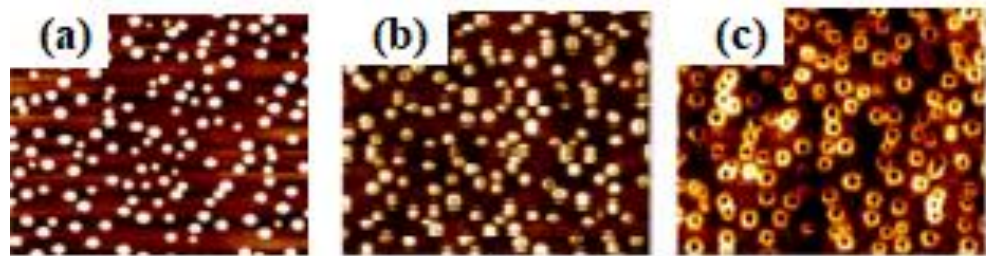
Un QD es una nanoestructura semiconductor que confina el movimiento en las tres direcciones espaciales de los electrones que se encuentran en la banda de conducción y de los huecos (excitones) en la banda de valencia. El confinamiento puede deberse a potenciales electrostáticos o a la presencia de una interfaz entre diferentes materiales semiconductores. Una de las propiedades que tienen los QDs se genera cuando estos son iluminados, porque los QDs reemite luz en una longitud de onda específica que depende del tamaño del punto, así entre más pequeños sean, menor es la longitud de onda emitida.

Con el progreso en las técnicas de fabricación de los QDs, los puntos cuánticos autoensablados (SAQD-Self Assembled Quantum Dots), son actualmente los más investigados. Estas estructuras son crecidas mediante la técnica epitaxial, la cual ofrece algunas variantes que se conocen como modos de crecimiento, así cada modo viene determinado por las condiciones en las que dicho crecimiento se realiza (temperatura del sustrato, velocidad de deposición de materiales, etc.) y de las propiedades de los materiales (constantes de red, constantes elásticas, etc.). Uno de los elementos que condiciona el crecimiento de los QDs es el desajuste entre las constantes de red del material depositado y del sustrato. Cuando este desajuste es notable, como en el caso del InAs depositado sobre un sustrato de GaAs, en el que se calcula un desajuste entre las constantes de red del 7%, se observa que únicamente las primeras capas se cristalizan en forma epitaxial y que al llegar a un espesor crítico las últimas monocapas sufren una comprensión lateral que conlleva a la formación de islas de dimensiones nanométricas, estas son denominadas SAQD debido al carácter espontáneo en el que se da su crecimiento.

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

velocidad de crecimiento, entre otras, esto permite construir SAQDs con diferentes formas. Las figuras geométricas que se visualizan por técnicas como la Microscopia de fuerza atómica (AFM, Atomic force microscopy), tienen perfil usualmente de lentes, pirámides, pirámides truncadas, con alturas entre 2-8nm y los radios de sus bases entre 20-70nm. La figura 1, muestra algunas imágenes tomadas con AFM, en la que se aprecian en la parte (a) los QDs y su transformación a otro tipo de estructuras al realizar recubrimiento bajando la temperatura desde 520°C hasta 450°C, así en (b) se observan QD con forma de volcanes y en (c) anillos cuánticos, QR (Quantum Rings)²³.

Figura 1. Imágenes de $1 \times 1 \mu\text{m}^2$ por la técnica AFM de (a) QDs, (b) QDs con forma de volcanes y (c) QR anillos cuánticos.



Fuente: LING, Hong-Shi and LEE, Chien-Ping. Evolution of self-assembled InAs quantum ring formation. *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 102, no 2, p. 024314.

Las dimensiones de los QR contienen un tamaño lateral o diámetro externo entre 60 y 140nm, una altura reducida de 2-4nm y un hueco central de 20-30nm²⁴. Estas estructuras fueron reportadas por primera vez para islas de GaAs recubiertas por InAs usando el crecimiento por epitaxia de haces moleculares en el modo de

²³ LING, Hong-Shi and LEE, Chien-Ping. Evolution of self-assembled InAs quantum ring formation. *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 102, no 2, p. 024314.

²⁴ WU, Yiyang; FAN, Rong; and YANG, Peidong. Block-by-block growth of single-crystalline Si/SiGe superlattice nanowires. *Nano Letters*, 2002, vol. 2, no 2, p. 83-86.

Stranski-Krastanov,^{25, 26}. La topología de los QR, ver figura 1 (c), es una estructura diferente a los QDs, esto es interesante por varios motivos: Primero, por la apariciones de las oscilaciones Aharonov-Bohm y las corrientes persistentes en presencia de campo magnético, segundo, mayor posibilidad de ajustar sus estados electrónicos y tercero, entre las variaciones geométricas se puede mencionar la posibilidad de variar su radio interno, el cual al tender a cero permite alcanzar un sistema bidimensional (disco cuántico) y si su espesor se hace muy pequeño podría formarse un sistema unidimensional.

Los QR también pueden estar acoplados de forma horizontal o vertical, a este tipo de organización se denomina puntos cuánticos acoplados (CQDs-Coupled Quantum Dots) o puntos cuánticos moleculares (QDMs- Quantum Dots Molecular), estas estructuras son más reales desde el punto de vista experimental, debido a que la formación de los SAQD no se realizan formando un solo punto, si no por el contrario, estos se forman a lo largo y ancho del semiconductor, estos sistemas tienen dentro de sus aplicaciones tecnológicas la implementación en compuertas lógicas en computación²⁷. El acoplamiento vertical de los QDMs ha sido más extensamente estudiado²⁸, por lo que hay menos trabajos teóricos para los acoplamientos horizontales²⁹.

Estudios teóricos sobre el efecto en las propiedades moleculares de un electrón confinado en dos QDMs acoplados horizontalmente en presencia de un campo

²⁵ SUGIMOTO, Y.; IKEDA, N.; CARLSSON, N.; ASAKAWA, K.; KAWAI, N. & INOUE, K Light-propagation characteristics of Y-branch defect waveguides in AlGaAs-based air-bridge-type two-dimensional photonic crystal slabs. 2002. Vol. 27, Issue 6, pp. 388-390.

²⁶ BIMBERG, D.; KIRSTAEDTER, N.; LEDENTSOV, N.; ALFEROV, Z.; KOPEV, P. S.; USTINOV, V. M. InAs–GaAs quantum pyramid lasers: in situ growth, radiative lifetimes and polarization properties. Japanese journal of applied physics, 1996, vol. 35, no 2S, p. 1311.

²⁷ KIM, J. S.; SONG, J. D.; BYEON, C. C.; KANG, H.; JEONG, M. S.; CHO, N. K.;... LEE, J. Fabrication of coupled GaAs quantum dots and their optical properties. *Physica Status Solidi C*, 2009, vol. 6, no 4, p. 802-805.

²⁸ GUTIÉRREZ, William; MARIN, Jairo H.; and MIKHAILOV, Ilia D. Charge transfer magnetoexciton formation at vertically coupled quantum dots. *Nanoscale research letters*, 2012, vol. 7, no 1, p. 585.

²⁹ RAITH, Martin; STANO, Peter; and FABIAN, Jaroslav. Theory of single electron spin relaxation in Si/SiGe lateral coupled quantum dots. *Physical Review B*, 2011, vol. 83, no 19, p. 195318.

eléctrico, muestran como el rompimiento en la simetría rotacional de la estructura modifica las curvas de energía y sus propiedades ópticas y eléctricas^{30,31}. A partir del estudio de estos sistemas, se han ido agregando estudios teóricos relacionados con múltiples QDs de los cuales se espera una física aún más interesante. Los puntos cuánticos triples (TCQDs, Triple Coupled Quantum Dots) son un buen ejemplo, pues dentro de los cálculos teóricos realizados para estas estructuras se ha estudiado la posibilidad de detección del entrelazamiento del spin y el efecto Kondo³².

Las nanoestructuras de preferencia para realizar computación cuántica son los puntos cuánticos acoplados horizontalmente con cuatro puntos cuánticos, estos se llaman puntos cuánticos cuádruples (QQDs, Quadra-Quantum Dots)³³. Cuando estos puntos están organizados de forma horizontal y si hay dos electrones confinados, la fuerza de repulsión hace que el confinamiento de los dos electrones trabaje como un hilo de transmisión de información digital, ver figura 2.

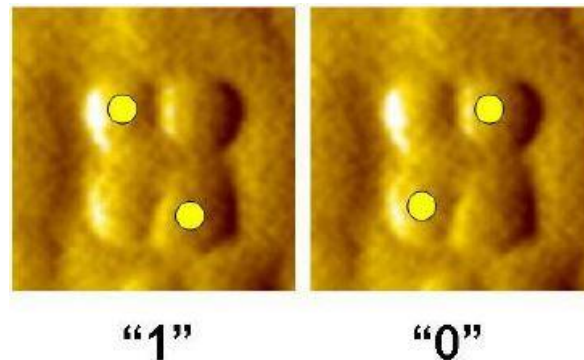
³⁰ DUQUE, Carlos Alberto; MORALES, Álvaro; y MORA-RAMOS, Miguel. Propiedades ópticas de impurezas donadoras en anillos cuánticos sometidos a los efectos combinados de campo eléctrico y radiación láser intensa no resonante. *Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, 2015, vol. 39, p. 67-76.

³¹ CORREDOR, Carlos Teófilo; GUTIÉRREZ, Willian. Molecular states of laterally coupled quantum dots under electric fields. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, 2014, no 71, p. 17-24.

³² AMAHA, S.; HATANO, T.; KUBO, T.; TOKURA, Y.; AUSTING, D. G.; and TARUCHA, S. Stability diagrams of laterally coupled triple vertical quantum dots in triangular arrangement. *Applied Physics Letters*, 2009, vol. 94, no 9, pp. 092-103.

³³ PANYAKEOW, Somsak. Quadra-Quantum Dots and Related Patterns of Quantum Dot Molecules: Basic Nanostructures for Quantum Dot Cellular Automata Application. *Cellular Automata & Innovative Modelling for Science and Engineering*, 2011, p. 95.

Figura 2. Representación digital del confinamiento de dos electrones dentro del sistema de puntos cuánticos cuádruples QQDs



Fuente: BOONPENG, P.; JEVASUWAN, W.; SURAPRAPAPICH, S.; RATANATHAMMAPHAN, S., and PANYAKEOW, S. Quadra-quantum dots grown on quantum rings having square-shaped holes: Basic nanostructure for quantum dot cellular automata application. *Microelectronic Engineering*, 2009, vol. 86, no 4-6, pp. 853-856

Las imágenes tomadas por AFM mostradas en la figura 2, fueron adquiridas por una metodología de crecimiento reportada recientemente, esta se ha desarrollado como una combinación de dos técnicas diferentes para crear moléculas de puntos cuánticos a partir de plantillas de anillos cuánticos. La primera técnica es la epitaxia de gotas, que se utiliza para desarrollar estructuras de anillos cuánticos de InGaAs, con la que se obtienen anillos que no son uniformes. El segundo es el modo de crecimiento convencional Stranski-Krastanow, que crea cuatro puntos cuánticos de InAs sobre los nano huecos de InGaAs. La combinación de estas dos técnicas ha ayudado a superar algunas limitaciones de cada técnica individual, lo que llevó a una fabricación novedosa de cuatro puntos cuánticos en una molécula de punto cuántico³⁴. Estos puntos QQDs se pueden usar como una celda básica de autómatas celulares de puntos cuánticos, en los que dos electrones se localizan en dos de los puntos cuánticos a lo largo de cualquier dirección diagonal que

³⁴ BOONPENG, P.; JEVASUWAN, W.; SURAPRAPAPICH, S.; RATANATHAMMAPHAN, S., and PANYAKEOW, S. Quadra-quantum dots grown on quantum rings having square-shaped holes: Basic nanostructure for quantum dot cellular automata application. *Microelectronic Engineering*, 2009, vol. 86, no 4-6, pp. 853-856.

representa "1" o "0" en un sistema de qubits. Sin embargo, en la aplicación, se requieren puntos cuánticos cuádruples uniformes.

A partir de estos resultados experimentales, se propuso estudiar teóricamente las propiedades magnéticas y eléctricas para puntos cuánticos de GaAs/AlAs en formas de una lente (QD), un anillo (QR), un anillo doble concéntrico (DCQR) y un anillo triple concéntrico (TCQR).

2. MODELADO MATEMATICO DE PUNTOS CUÁNTICOS

2.1 MÉTODOS DE FABRICACIÓN DE PUNTOS CUÁNTICOS

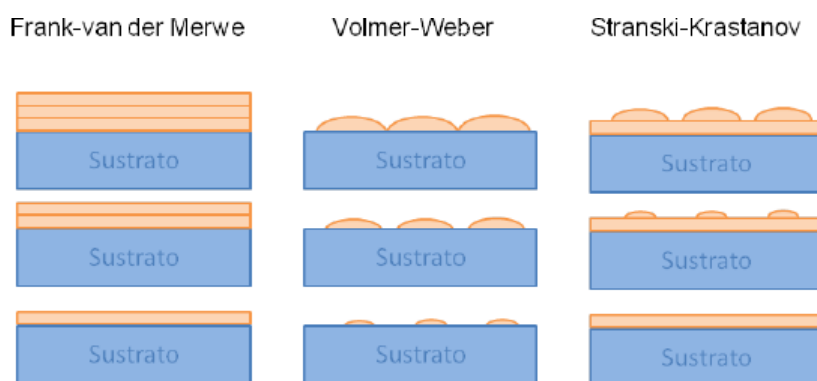
En las últimas dos décadas, se ha perfeccionado las técnicas de fabricación de los puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQDs), mediante el surgimiento de técnicas como MBE (Molecular Beam Epitaxy). En la técnica MBE, los elementos constituyentes del material a crecer son propulsados en forma de un haz molecular dirigido hacia un sustrato cristalino, sobre el cual se forma la película epitaxial. El haz o haces emergentes provienen de una evaporación térmica de fuentes sólidas elementales de muy alta pureza, las cuales se encuentran contenidas en crisoles (contenedores), se hallan muy cerca del sustrato. En los sistemas MBE, se usan generalmente elementos de la tabla periódica III-V, que contienen materiales sólidos de Al, Ga, As, Be, In y Si de alta pureza. En algunos sistemas suelen utilizarse fuentes de gases, como el nitrógeno o hidrógeno y las cámaras de crecimiento se mantienen en un ambiente de ultra alto vacío (UAV), a una presión del orden de 10-11 torr, que garantiza la pureza del material en las fuentes³⁵.

Experimentalmente, la técnica MBE, tiene unas características muy importantes para el crecimiento de estas nanoestructuras, entre ellas pueden mencionarse: el control de características físicas como el espesor, la composición y el dopado, esto se logra debido a las bajas velocidades de crecimiento; reduce los problemas de inter difusión de elementos y dopantes, manteniendo un crecimiento moderado (600°C); y mejoramiento progresivo en la planitud de la superficie, debido al mecanismo de crecimiento. A partir de estas características, se pueden mencionar tres modos de crecimiento basados en la MBE: los métodos de Frankvan der

³⁵ LÓPEZ-LÓPEZ, M.; and MÉNDEZ-GARCÍA, V. H. Autoensamblado de puntos cuánticos semiconductores. *Cinvestav*, 2008, p. 44-49.

Merwe³⁶, Volmer-Werner³⁷ y Stranski-Krastanov³⁸. El modo Frank-van der Merwe (FvdM) corresponde a un crecimiento planar del material, monocapa a monocapa; el modo Volmer-Werner (VW) corresponde a un crecimiento tridimensional con formación de islas sobre la superficie del sustrato desde el inicio del crecimiento; y el modo Stranski-Krastanov (SK) es un caso mixto que presenta una primera etapa con crecimiento planar y una transición a un crecimiento tridimensional cuando se alcanza un espesor crítico depositado, ver figura 3.

Figura 3. Representación esquemática de los modos de crecimiento Frank-van der Merwe, Volmer-Werner y Stranski-Krastanov en heteroepitaxia.



Fuente: LÓPEZ-LÓPEZ, M.; and MÉNDEZ-GARCÍA, V. H. Autoensamblado de puntos cuánticos semiconductores. *Cinvestav*, 2008, p. 44-49.

El método de Stransky-Krastanov (S-K) se basa en la relajación de energía elástica producida por la diferencia en las constantes de red del material a depositar y del sustrato. Este modo de crecimiento puede ser ilustrado al tomar como ejemplo el

³⁶ WILLEMS, D. J.; VAN DER MERWE, J.H.; WOODWARD, M. P.; ROWLAND, M. P.; POWERS, M. H.; JULIARD, P. A... and FORDHAM, D. S. *Discussions of the Faraday Society*, 1949, vol. 5, p. 283-291.

³⁷ PILLONNET, A.; PEREIRA, A.; MARTY, O., and CHAMPEAUX, C. Valence state of europium doping ions during pulsed-laser deposition. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2011, vol. 44, no 37, p. 375402.

³⁸ SEIFERT, W.; CARLSSON, N.; MILLER, M.; Pistol, M. E.; and SAMUELSON, L. In-situ growth of quantum dot structures by the Stranski-Krastanow growth mode. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, 1996, vol. 33, no 4, p. 423-471.

crecimiento de InAs (constante de red $6.05 \text{ \AA}$) sobre GaAs (constante de red $5.65 \text{ \AA}$), los cuales tienen un desacople de redes de aproximadamente 7%. En la parte inicial del crecimiento, el depósito de InAs crece acoplado al substrato de GaAs, formando lo que se conoce como capa de mojado o capa húmeda, como se ilustra en la figura 4a. Sin embargo, el desajuste en los parámetros de red produce esfuerzos que provocan la deformación elástica del InAs y se produce una acumulación de energía elástica a medida que avanza el crecimiento, esto se conoce como crecimiento pseudomórfico. A medida que aumenta el volumen del elemento depositado, se sigue acumulando energía elástica hasta que alcanza un espesor crítico en el que la energía acumulada es liberada por medio de una formación espontánea o autoensamble de nanoislas, ver figura 4b. En este proceso de autoensamble se originan miles de millones de QDs con diámetros entre 1 y 10 nanómetros³⁹ [31].

Figura 4. a) Ilustración del régimen de crecimiento pseudomórfico y (b) la posterior formación de nano-islas durante el modo de crecimiento Stransky-Krastanov.



Fuente: LÓPEZ-LÓPEZ, M.; and MÉNDEZ-GARCÍA, V. H. Autoensamblado de puntos cuánticos semiconductores. *Cinvestav*, 2008, p. 44-49.

³⁹ LÓPEZ-LÓPEZ, M.; and MÉNDEZ-GARCÍA, V. H. Autoensamblado de puntos cuánticos semiconductores. *Cinvestav*, 2008, p. 44-49.

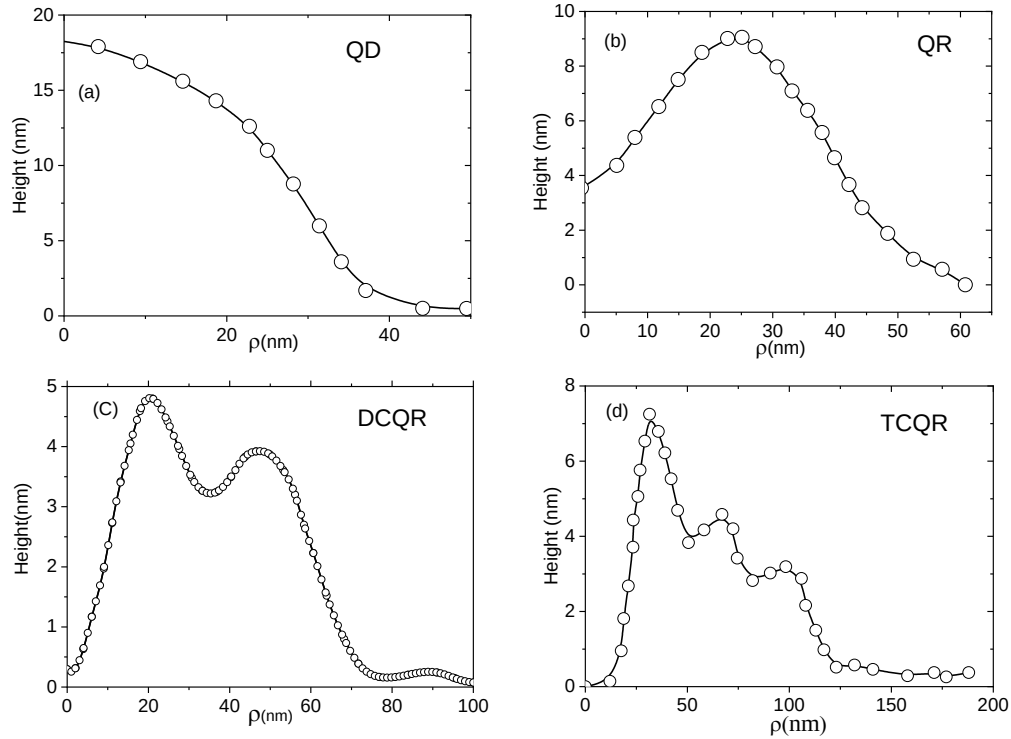
2.2 MODELAMIENTO DE LA MORFOLOGÍA DE UN PUNTO CUÁNTICO AISLADO

La mayoría de las investigaciones teóricas dedicadas al estudio de puntos cuánticos utilizan uno de los dos siguientes modelos matemáticos; el primer modelo propone que los bordes de confinamiento de los puntos cuánticos son abruptos lo que conduce a que los potenciales de confinamiento se consideren de forma rectangular, el segundo modelo heurístico propone un confinamiento parabólico. Actualmente, estos dos modelos no reflejan adecuadamente la morfología real del QD alcanzada con los métodos de fabricación existentes, debido a que en los QDs reales el grosor en los bordes disminuye en una forma gradual. Así que, para analizar el impacto del cambio gradual del grosor en los bordes de la película de los QDs, sobre las propiedades espectrales, se consideró un modelo morfológico construido a partir de los perfiles escaneados de los QDs por microscopia de fuerza atómica. Este método proporciona una descripción más adecuada de la geometría de los QDs tanto si están aislados o si se encuentran en grupo acoplados lateralmente.

Se inicia la descripción del modelo propuesto en esta investigación, considerando un QD con simetría axial. En este caso, la morfología de un QD, está dada en coordenadas polares por una sola función $h = h(r)$, que define la variación del grosor a lo largo de uno de los cortes en la dirección radial. El perfil 3D se reproduce en este caso mediante una rotación de esta función alrededor de eje Z. En la Fig.5 se presentan algunos ejemplos de los cortes a lo largo del corte para un QD (quantum dot), un QR (quantum ring), un DCQR (double concentric quantum ring),

y un TCQR (triple concentric quantum ring) encontrados en las referencia^{40, 41}, usando técnicas de microscopía de fuerza atómica.

Figura 5. Digitalización de perfiles de un QD, un QR, un DCQR y un TCQR encontrados experimentalmente de los espectros de microscopía de fuerza atómica



Fuente: MANO, T.; KURODA, T.; SANGUINETTI, S.; OCHIAI, T.; TATENO, T.; KIM, J... and KOGUCHI, N. Self-assembly of concentric quantum double rings. *Nano letters*, 2005, vol. 5, no 3, p. 425-428.; ABBARCHI, M.; CAVIGLI, L.; SOMASCHINI, C.; BIETTI, S.; GURIOLI, M.; VINATTIERI, A.; and SANGUINETTI, S. Micro-photoluminescence of GaAs/AlGaAs triple concentric quantum rings. *Nanoscale research letters*, 2011, vol. 6, no 1, p. 569.

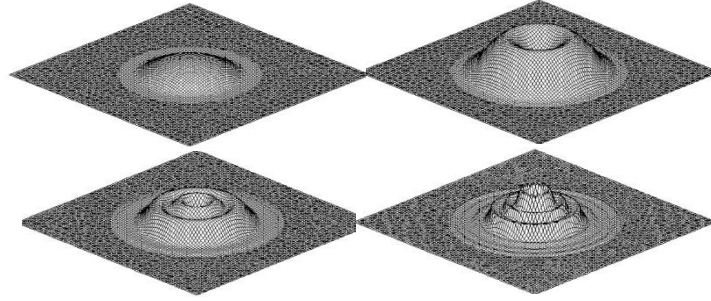
En la parte numérica se digitalizaron las curvas experimentales sobre una malla arbitraria $(r_i, h_i, i=1,2,...,N)$ y a partir de esta tabla se construyó para cada corte una

⁴⁰ MANO, T.; KURODA, T.; SANGUINETTI, S.; OCHIAI, T.; TATENO, T.; KIM, J... and KOGUCHI, N. Self-assembly of concentric quantum double rings. *Nano letters*, 2005, vol. 5, no 3, p. 425-428.

⁴¹ ABBARCHI, M.; CAVIGLI, L.; SOMASCHINI, C.; BIETTI, S.; GURIOLI, M.; VINATTIERI, A.; and SANGUINETTI, S. Micro-photoluminescence of GaAs/AlGaAs triple concentric quantum rings. *Nanoscale research letters*, 2011, vol. 6, no 1, p. 569.

función interpolante $h(r)$ (ver figura 5). Un punto cuántico con la morfología axialmente simétrica correspondiente a cada uno de estos cortes se obtiene a través de la rotación alrededor de eje Z, $h(r) \xrightarrow{\text{rotación}} h(x,y) = h\left(\sqrt{x^2 + y^2}\right)$. Las imágenes 3D que se obtiene para los cortes de la figura 5 se presentan en figura 6.

Figura 6. Imágenes de QDs axialmente simétricos, derivados para los cortes de la Figura 5.



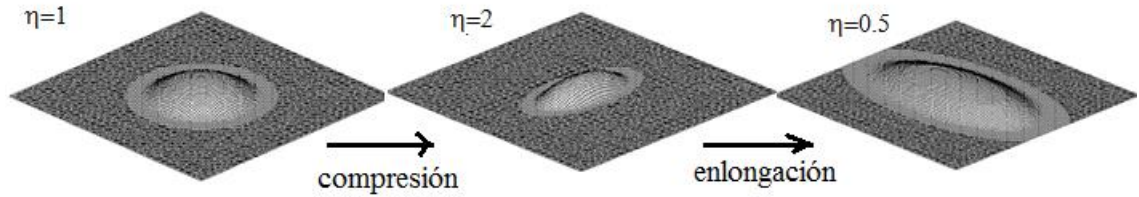
El siguiente paso hacia un modelo más realista consistió en considerar una relación entre la asimetría de los QDs con la anisotropía de la red cristalina, esto se realiza mediante una transformación de compresión, que completa la transformación de rotación acorde con:

$$h(r) \xrightarrow{\text{rotación}} h(x,y) = h\left(\sqrt{x^2 + y^2}\right) \xrightarrow{\text{compresión}} h(x,y) = h\left(\sqrt{x^2 + (\eta y)^2}\right) \quad (1)$$

En la ecuación 1, aparece un nuevo parámetro η que representa la excentricidad, este puede tomar valores tales que si $\eta=1$ corresponde a un perfil circular, si toma valores $\eta > 1$ el sistema corresponde a QDs comprimidos a lo largo de eje Y, y si toma los valores $\eta < 1$ el sistema corresponde a QDs alargados a lo largo de eje Y.

En la Figura 7 se presentan ilustraciones correspondientes a estos casos para un QD.

Figura 7. Imágenes de puntos cuánticos asimétricos con diferentes parámetros de la excentricidad η .



2.3 MODELAMIENTO DE UN CLÚSTER DE QDS ACOPLADOS HORIZONTALMENTE

Las dos siguientes transformaciones matemáticas que pueden ser útiles para la descripción de un grupo de QDs agrupados horizontalmente son la traslación y reflexión. La transformación de traslación a lo largo del eje X una distancia a_x se describe como:

$$\begin{aligned}
 & \underbrace{h(r)}_{\text{corte}} \xrightarrow{\text{rotación}} h(x, y) = \underbrace{h\left(\sqrt{x^2 + y^2}\right)}_{\text{perfil circular}} \xrightarrow{\text{compresión asimétrico}} h(x, y) = \underbrace{h\left(\sqrt{x^2 + (\eta y)^2}\right)}_{\text{perfil asimétrico}} \rightarrow \\
 & \xrightarrow{\text{traslación a lo largo eje X}} h(x, y) = \underbrace{h\left(\sqrt{(x - a_x)^2 + (\eta y)^2}\right)}_{\text{perfil descentrado y asimétrico}}
 \end{aligned}
 \tag{2}$$

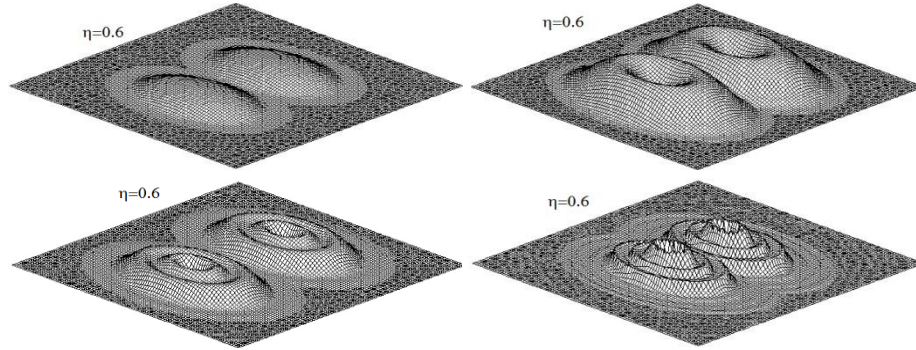
Finalmente, una transformación de reflexión respecto del plano YOZ consiste en reemplazar en la última expresión, la variable x por $|x|$, es decir una dependencia dada por la expresión:

$$h(x, y) \xrightarrow{\text{rotación+compresión asimétrico+traslación a lo largo eje X}} h\left(\sqrt{(|x| - a_x)^2 + (\eta y)^2}\right) \quad (3)$$

perfil de un doblete de QDs asimétricos,
centrados en los puntos $x = \pm a_x$

En la figura 8, se pueden observar imágenes construidas añadiendo estas dos últimas transformaciones.

Figura 8. Imágenes 3D de dobletes de QDs obtenidos para los cortes de la Fig. 5

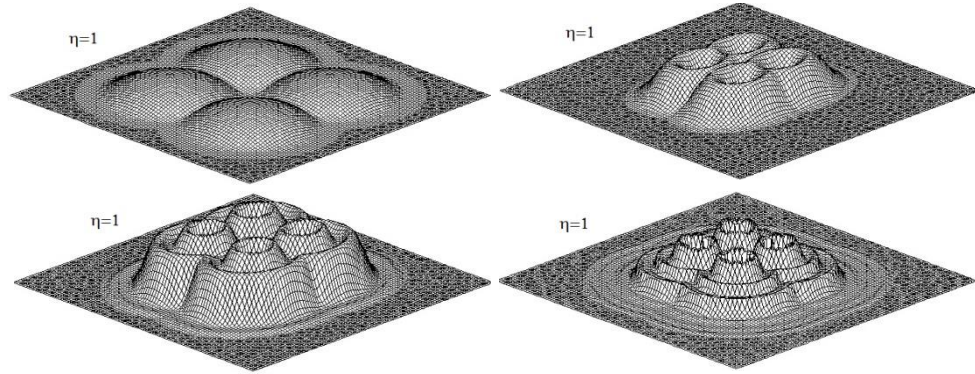


De manera similar se puede modelar los cuartetos de QDs haciendo las transformaciones de traslación a lo largo de eje Y en la distancia a_y , y de reflexión respecto el plano XOZ. Finalmente, la función que define la variación del grosor de una película delgada formada por cuatro QDs, cuyo corte en la dirección radial es $h(r)$ dada por una de las funciones interpolantes de la Fig.5, está definida mediante la función:

$$h(x, y) = h \left(\underbrace{\sqrt{(|x| - a_x)^2 + \eta^2 (|y| - a_y)^2}}_{\text{perfil de un cuartete de QDs}} \right) \quad (4)$$

A partir de esta expresión matemática (4) se formaron los dobletes de QD, QR, DCQR y TCQR, que se presentan en la figura 9.

Figura 9. Imágenes 3D de cuartetos de QDs obtenidos para los cortes de la Fig. 5



3. APROXIMACIÓN ADIABÁTICA

3.1 DESCRIPCIÓN APROXIMADA DE UNAS NANOESTRUCTURAS SEMICONDUCTORAS

Para estudiar el comportamiento de los portadores de carga confinados en los QDs, se requiere un análisis de un Hamiltoniano de muchos electrones y muchos núcleos, que involucra los términos de las energías cinéticas de los electrones y de los núcleos; las energías potenciales de interacción entre núcleos, entre electrones y entre electrones y núcleos. Dado que el sistema tiene un número de portadores de carga y de núcleos muy elevados, este análisis se puede realizar solamente al recurrir a unas técnicas y modelos aproximados.

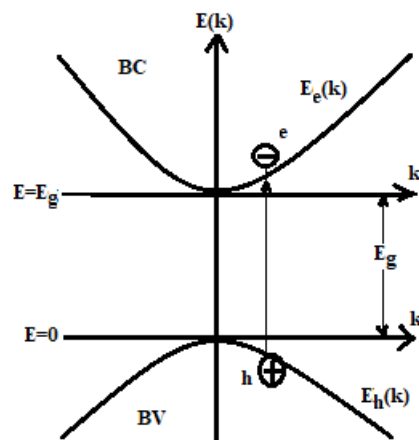
El modelo más simple y más usado en la teoría de los semiconductores es la aproximación de masa efectiva (AME), en la cual se desprecian tanto los términos en el Hamiltoniano que corresponden a la interacción entre electrones, como entre electrones y núcleos. El aporte a la energía de un semiconductor de los términos de la interacción electrón-electrón es realmente muy pequeño. Esto se debe al hecho de que en estos materiales la concentración de electrones es muy pequeña, menor de 10^{15}m^{-3} , siendo la separación promedio entre ellos mayor que 10^{-5}m , que corresponde a las energías electrostáticas de repulsión entre ellos, la cual es menor que 10^{-4}eV . Por esta razón, los electrones en un semiconductor pueden considerarse como partículas independientes.

Por otro lado, los iones ubicados en los nodos de una red cristalina generan un campo de potencial espacialmente periódico y el movimiento de un electrón en este campo es similar al movimiento libre, pero se describe no por ondas De Broglie $\psi_{\mathbf{k}} = Ce^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ sino por ondas de Bloch $\psi_{\mathbf{k}} = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, donde la función $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ es periódica. Sin embargo, hay fundamentales diferencias entre estos dos tipos de onda,

relacionados con los espectros energéticos que les corresponden. El espectro energético de la onda De Broglie es continuo y está dado por la curva de dispersión $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m$, en el caso de ondas de Bloch el espectro energético tiene una forma de bandas permitidas con las brechas entre ellas correspondientes a unas bandas prohibidas. Cada banda con su número n tiene su propia curva de dispersión $E_n(\mathbf{k})$, $n=1,2,\dots$.

Para temperatura $T=0^\circ\text{K}$, en un semiconductor todas las bandas con los niveles energéticos completamente ocupados, se llaman bandas de valencia (BV) y al contrario, las bandas completamente desocupadas se llaman bandas de conducción (BC). La diferencia entre la energía del piso de la BC y el techo de la BV se llama la brecha energética y se denota como E_g . Cuando la temperatura sube, una pequeña parte de electrones saltan desde la BV hacia BC formando un electrón de conducción en la BC y un hueco en la BV, que constituyen los dos tipos de portadores de carga.

Figura 10. Esquema de curvas de dispersión en las bandas de valencia y conducción



Como el número de electrones y huecos es muy pequeño, ambos portadores de carga se ubican en la curva de dispersión cerca de las correspondientes dependencias del punto $k=0$ (ver Figura 10). Al expandir las funciones $E_n(\mathbf{k})$, $n=e,h$. En las series de Taylor hasta el segundo orden se obtienen las dependencias similares a las fórmulas correspondientes para electrones libres que describen las ondas De Broglie:

$$\begin{aligned} E_h(\mathbf{k}) &= -\hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_h^*, \quad m_h^* = \hbar^2 / E_h''(0) \\ E_e(\mathbf{k}) &= E_g + \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m_e^*, \quad m_e^* = \hbar^2 / E_e''(0) \end{aligned} \quad (5)$$

Las fórmulas (5) corresponden a una estructura de bandas presentada esquemáticamente en la figura 10.

De esta manera en la AME los portadores de carga pueden considerarse como las ondas De Broglie, pero con las masas renormalizadas. Tres parámetros se necesitan para describir el comportamiento de los portadores de carga en la AME, las masas efectivas de electrón m_e^* y del hueco m_h^* y la brecha E_g entre las BV y BC. El análisis del efecto del confinamiento cuántico en una nanoestructura en la AME en presencia de los campos externos se reduce a la solución de la ecuación de Schrödinger en una región 3D con las condiciones de contorno sobre una frontera que tiene una forma a veces muy complicada. En la mayoría de los casos este problema puede resolverse solamente usando uno de los métodos numéricos.

Sin embargo, la eficiencia de los métodos numéricos se puede mejorar, si adicionalmente a la AME aplicamos la *aproximación adiabática* (A.A), que permite separar adicionalmente la coordenada Z del portador de carga y reducir notablemente el exigente trabajo computacional. Dicha aproximación es similar a la que se utiliza en el análisis de los espectros moleculares y cristalinos para separar el movimiento lento de los núcleos atómicos pesados del movimiento rápido los

electrones ligeros. A diferencia, la aplicación de la AA a los QDs, está basándose en la fuerte anisotropía en la morfología de estas estructuras, cuyas dimensiones en la dirección lateral son mucho más grandes que en la transversal. Como el confinamiento en la dirección transversal es mucho más fuerte, entonces, el movimiento en esta dirección es mucho más rápido, mientras que en la dirección lateral el movimiento es lento. La AA ha sido discutida en la literatura y ampliamente aplicada en varios trabajos y tesis de maestría y de doctorado⁴². La aplicación del método de la AA permite separar en la ecuación de Schrödinger la variable correspondiente al movimiento en la dirección transversal y reducir el problema 3D a uno más simple 2D. Los detalles de aplicación de la AA para analizar los espectros de portadores de carga confinados en clústeres de QDs se presentan en los siguientes párrafos.

3.2 MODELADO DE LOS PARÁMETROS DE UNA PELÍCULA DELGADA CON UN GROSOR VARIABLE

Todas las nanoestructuras descritas en el capítulo 3, tienen simetría rotacional tipo C_n con $n = 2, 4, \infty$ para QDs en cuartetos, dobletes y un único QD. Por esta razón, para separar las variables en la ecuación de Schrödinger es más adecuado utilizar las coordenadas cilíndricas; la variable Z se separa usando AA, la variable polar φ , usando el método de Fourier y la variable radial ρ con el método de barrido trigonométrico⁴³. En estas coordenadas un perfil de un clúster de QDs según la ecuación (3) tiene la siguiente forma:

⁴² MIKHAILOV, I. D.; GARCÍA, L. F.; and MARÍN, J. H. Vertically coupled quantum dots charged by exciton. *Microelectronics journal*, 2008, vol. 39, no 3-4, p. 378-382.

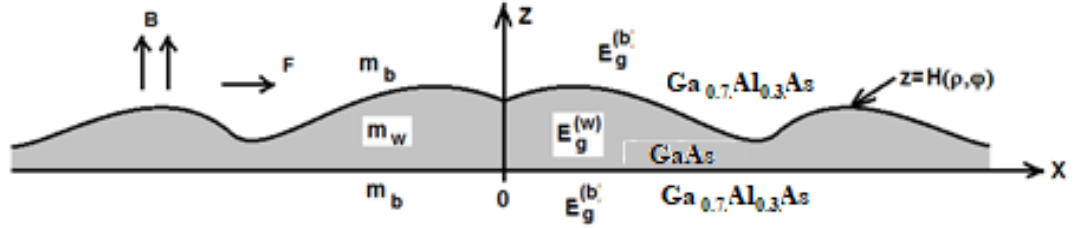
⁴³ MARIN CADAVID, Jairo Humberto. *Espectro Energetico De Los Sistemas De Pocas Particulas Fuertemente Confinadas En Heterojunturas Semiconductoras*. Tesis Doctoral. Universidad Industrial de Santander, Escuela de Física. 2008.

$$h(\rho, \varphi) = \underbrace{h \left(\sqrt{(\rho |\cos \varphi| - a_x)^2 + \eta^2 (\rho |\sin \varphi| - a_y)^2} \right)}_{\text{perfil de un cuartete de QDs}} \quad (6)$$

Esta fórmula describe los perfiles de un punto cuántico aislado cuando $a_x = a_y = 0$, un doblete, cuando $a_x \neq 0$ y $a_y = 0$ y un cuartete cuando $a_x \neq 0$ y $a_y \neq 0$.

3.2.1 Variación de los parámetros de un material en las fronteras de QDs. Un clúster de QDs idénticos de GaAs, ubicados sobre un sustrato de Ga(Al)As y recubierto por encima por el mismo material de Ga(Al)As, puede considerarse como una capa delgada de GaAs con un grosor variable sumergido en una matriz de material de Ga(Al)As por ambos lados, como se muestra la figura 11. En las fronteras entre la película de GaAs y la matriz, los parámetros del material correspondientes al modelo de AME (masas efectivas m^* y la brecha E_g) se varían paulatinamente en la dirección transversal, la primera vez en la frontera inferior cuando $z=0$ y la segunda vez en la frontera superior cuando $z=h(\rho, \varphi)$. Es decir, los parámetros de AME, la masa efectiva m^* y la brecha de energía E_g , en este modelo son funciones de la coordenada z , las cuales adquieren los valores $m_w, E_g^{(w)}$ dentro de la película delgada ("well") y valores $m_b, E_g^{(b)}$ dentro de la matriz ("barrier"). En los bordes inferior y superior estas funciones cambian sus valores a salto, lo que sugiere, para descripción de su comportamiento, el uso de la función de Heaviside, $\mathcal{H}(x)=0$ para $x < 0$ y $\mathcal{H}(x)=1$ para $x > 0$

Figura 11. Representación esquemática de un corte a lo largo de eje X de un cuartete de QDs que puede considerarse como una película delgada de GaAs, de grosor variable y con un sustrato plano, sumergida en la matriz de Ga (Al)As



De acuerdo con las notaciones anteriores, la dependencia de los parámetros de un modelo de AME, la masa efectiva m^* , la brecha E_g y el potencial de confinamiento V_{conf} dependen de la coordenada z de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} m^*(z) &= m_w \mathcal{G}(z) \mathcal{G}[h(\rho, \varphi) - z] + m_b \{ \mathcal{G}(-z) + \mathcal{G}[z - h(\rho, \varphi)] \} \\ E_g(z) &= E_g^{(w)} \mathcal{G}(z) \mathcal{G}[h(\rho, \varphi) - z] + E_g^{(b)} \{ \mathcal{G}(-z) + \mathcal{G}[z - h(\rho, \varphi)] \} \\ V_{conf}(z) &= V_0 \{ \mathcal{G}(-z) + \mathcal{G}[z - h(\rho, \varphi)] \}; \quad V_0 = 0.6(E_g^{(b)} - E_g^{(w)}) \end{aligned} \quad (7)$$

Se supone además que los campos eléctrico F y magnético B son homogéneos y se dirigen en las direcciones como se muestra en figura 11 y sus componentes en coordenadas cilíndricas (ρ, φ, z) son las siguientes:

$$\mathbf{F} = (F, 0, 0); \quad \mathbf{B} = (0, 0, B) \quad (8)$$

En la expresión para el potencial de confinamiento en las fórmulas (7), se tiene en cuenta que en la juntura de GaAs y Ga_{0.7}Al_{0.3}As los saltos de la BC (Banda de conducción) y la BV (Banda de valencia) correspondiente a la altura de la barrera

$V_0 = 0.6(E_g^{(b)} - E_g^{(w)})$, las cuales en las junturas constituyen el 60% y el 40% de la diferencia de brechas en estos dos materiales respectivamente.

3.2.2 Parámetros de aleaciones binarias y ternarias. En la tabla 1, se muestran algunos parámetros que están relacionados con dos propiedades importantes del material; las masas efectivas de portadores de carga, del electrón y hueco y la brecha de energía entre BV y BC.

Tabla 1. Propiedades electrónicas para el GaAs y $Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ (ver referencia [35])

Propiedad	GaAs	$Al_{0.3}Ga_{0.7}As$
m_e^*/m_0	$m_{we} = 0.067$	$m_{be} = 0.093$
m_h^*/m_0	$m_{wh} = 0.51$	$m_{bh} = 0.57$
E_g	$E_g^{(w)} = 1.52eV$	$E_g^{(b)} = 1.96eV$

Nota: (En tabla m_0 es la masa de electrón, m^* -masa efectiva de portador)

Se presenta a continuación la lista de las notaciones que se utilizaron en la Tabla 1 y a continuación las que se utilizaron en esta tesis.

m_{we} : Masa efectiva (adimensional) del electrón dentro de la película

m_{wh} : Masa efectiva (adimensional) del hueco dentro de la película

$E_g^{(w)}$: Brecha energética entre bandas de valencia y de conducción dentro de la película

m_{be} : Masa efectiva (adimensional) del electrón fuera de la película

m_{bh} : Masa efectiva (adimensional) del hueco dentro fuera de la película

$E_g^{(b)}$: Brecha energética entre bandas de valencia y de conducción fuera de la película

3.2.3 Unidades adimensionales. La solución numérica de la ecuación de Schrödinger para analizar el espectro de un sistema cuántico sugiere el uso de las unidades adimensionales para evitar los errores por redondeo, relacionados con los valores demasiado pequeños de los parámetros físicos en las unidades macroscópicas. En esta investigación, se utilizaron unidades atómicas efectivas, teniendo en cuenta que en un semiconductor bajo AME, se reemplaza la masa actual de electrón m_0 por la masa efectiva m^* , y en el potencial electrostático para interacción entre portadores de carga se introduce la constante dieléctrica ϵ . Y como la unidad de longitud se escoge el *radio de Bohr efectivo* a_0^* definido y calculado para el material de GaAs de la siguiente manera:

$$a_0^* = \frac{4\pi\epsilon_0\epsilon\hbar^2}{e^2 m_{GaAs}^*} = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{\underbrace{e^2 m_e}_{a_B}} \cdot \frac{m_e}{m_{GaAs}^*} \cdot \epsilon = a_B \frac{12.5}{0.067} \approx 0.0529 \text{ nm} \cdot 285.7 \approx 9.9 \text{ nm}$$

Aquí a_B es el radio de Bohr estándar que se utiliza en la Física atómica y $\epsilon = 12.5$ es la constante dieléctrica del material GaAs.

Como unidad de energía se escoge el *Rydberg efectivo* Ry^* , relacionado con el Rydberg atómico Ry calculado a continuación para GaAs.

$$R_y^* = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0\epsilon a_0^*} = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 a_B} \cdot \frac{a_B}{a_0^*} \cdot \frac{1}{\epsilon} = Ry \cdot \frac{0.0529}{9.9} \cdot \frac{1}{12.5} \approx 5.83 \text{ meV}$$

La unidad adimensional γ de campo magnético se define como:

$$\gamma = \text{Energia Magnética} / \text{Rydberg Efectivo} = \mu_B^* B / Ry^* = e\hbar B / 2m_{GaAs}^* R_y^*$$

$$\gamma = \frac{e\hbar B}{2m_{GaAs}^* R_y^*} \approx \frac{\cancel{1.6 \cdot 10^{-19}} \cdot 1.055 \cdot \cancel{10^{-34}}}{2 \cdot 0.067 \cdot 9.1 \cdot \cancel{10^{-31}} \cdot 5.83 \cdot \cancel{10^{-3}} \cdot \cancel{1.6 \cdot 10^{-19}}} B \approx 0.15 \cdot B(T)$$

Aquí el campo magnético dado en teslas está relacionado con el campo magnético adimensional como $B(T) \approx 6.7 \cdot \gamma$

De manera similar se define la unidad de campo eléctrico α :

$$\begin{aligned} \alpha &= \frac{\text{Energía de Campo Eléctrico}}{R_y^*} \frac{ea_0^* F}{R_y^*} \gg \frac{\cancel{1.6 \cdot 10^{-19}} \times 9.9 \times 10^{-9} F(V/m)}{5.83 \times 10^{-3} \times \cancel{1.6 \cdot 10^{-19}}} = \\ &= \frac{9.9 \times 10^{-9} \times 10^5 F(kV/cm)}{5.83 \times 10^{-3}} \gg 0.17 \times F(kV/m) \end{aligned}$$

Aquí el campo eléctrico dado en kV/cm está relacionado con el campo magnético eléctrico adimensional α como $F(kV/cm) \gg 5.9 \alpha$.

Finalmente, la altura de la barrera en la juntura de $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ es:

$$V_0 = 0.6 \left(E_g^{(b)} - E_g^{(w)} \right) = 260 meV = 44.6 R_y^*$$

3.3 ECUACIÓN DE ONDA PARA EL ELECTRÓN EN UNIDADES ADIMENSIONALES

Teniendo en cuenta que los parámetros del material se varían solamente en la dirección vertical, el Hamiltoniano de un electrón, confinado en una película delgada, en coordenadas cilíndricas usando unidades adimensionales puede presentarse de la siguiente forma:

$$\left[-\frac{\partial}{\partial z} \left(\eta(z, \rho, \varphi) \frac{\partial}{\partial z} \right) - \Delta_{\rho, \varphi} + V_c(z, \rho, \varphi) + V_m(\rho, \varphi) + V_e(\rho, \varphi) \right] \Psi(z, \rho, \varphi) = E \Psi(z, \rho, \varphi) \quad (9)$$

Aquí la función $\eta(z)$ define la variación de la masa efectiva del electrón en la dirección vertical al pasar desde el material del pozo, GaAs, al material de la barrera Ga(Al)As

$$\eta(z, \rho, \varphi) = \frac{m_w}{m^*(z, \rho, \varphi)} = \frac{m_w}{m_b} \left[\theta(-z) + \theta(z - H(\rho, \varphi)) \right] + [\theta(z) \theta(H(\rho, \varphi) - z)] \quad (9a)$$

Siendo $\theta(z)$ la función de paso de Heaviside. Adicionalmente, en la ecuación (9), $\Delta_{\rho, \varphi}$ es el Laplaciano 2D en las coordenadas polares y hay tres aportes de diferentes potenciales. El primero de ellos corresponde al potencial de confinamiento relacionado con el desajuste de las bandas de conducción en las junturas de dos materiales, en la dirección vertical:

$$V_c(z, \rho, \varphi) = \frac{0.6(E_g^{(b)} - E_g^{(w)})}{Ry^*} [\theta(-z) + \theta(z - H(z, \rho, \varphi))] \quad (9b)$$

El segundo potencial comprende dos términos de la energía paramagnética y diamagnética

$$V_{mag}(\rho, \varphi) \approx i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{2}; \quad \gamma = \frac{\hbar \omega_c}{Ry^*} = \frac{e\hbar B}{2m_w R_y^*} \approx 0.15 \cdot B(T) \quad (9c)$$

Siendo γ la energía adimensional del primer nivel de Landau para un confinamiento diamagnético. Finalmente, $V_{elect}(\rho, \varphi)$ es la energía de la interacción del electrón con el campo eléctrico externo F aplicado en el plano XOY cuya dirección forma con el eje X un ángulo ϑ :

$$V_{elect}(\rho, \varphi) = \alpha \rho \cos \varphi; \alpha = \frac{ea_0^* F}{Ry^*} \approx 0.17 \cdot F (kV / cm) \quad (9d)$$

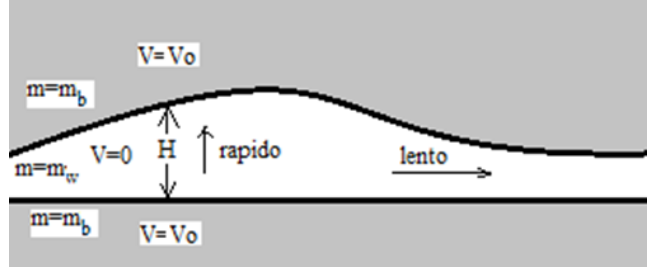
La ecuación diferencial (9) contiene tres variables independientes, y para facilitar su solución se separó la variable vertical Z, utilizando el hecho de que la estructura de los QDs, es fuertemente anisotrópica, en la cual el movimiento del electrón en la dirección Z es fuertemente restringido, lo que permitió utilizar la aproximación adiabática (AA)

3.4 SEPARACIÓN DE VARIABLES LA APROXIMACIÓN ADIABÁTICA

Una gran mayoría de los QDs fabricados actualmente tienen una estructura fuertemente anisotrópica, es decir, el valor D que caracteriza el máximo grosor de un QD es mucho menor que la dimensión lateral correspondiente a dos radios ($D=2R$). Teniendo en cuenta que la energía cinética relacionada con el confinamiento es inversamente proporcional al cuadrado de la dimensión de la región de confinamiento, uno puede ver que *la razón de las Energías cinéticas de los movimientos del electrón en las direcciones transversal y lateral es proporcional a $D^2/4R^2$* . Esta razón en los QDs actuales es del orden 0.01 y por eso el movimiento del electrón es mucho más rápido verticalmente en comparación con el movimiento lateral (ver figura 12). En consecuencia, el primer término en el

Hamiltoniano (9) es mucho mayor (más que en 199 veces) que el segundo, y este hecho permitió utilizar la AA.

Figura 12. Representación esquemática del ancho de la película en comparación con su altura.



En la AA, la función de onda 3D toma la forma de un producto de dos funciones, una $f(z) = f_{fast}(z)$ que describe el movimiento rápido del electrón en la dirección transversal de la capa delgada, y la otra función $\Phi(\rho, \varphi) = \Phi_{slow}(\rho, \varphi)$, la cual describe el movimiento lento en la dirección lateral, es decir:

$$\Psi(\rho, \varphi, z) = f_{fast}(z) \Phi_{slow}(\rho, \varphi) = f(z) \Phi(\rho, \varphi) \quad (10)$$

El procedimiento de la AA consiste de dos pasos. En el primer paso, los términos segundo, cuarto y quinto del Hamiltoniano (9) se desprecian, ya que ellos son más de 100 veces menores que los términos primero y tercero.

Después de eliminar los términos pequeños en el Hamiltoniano (9) la ecuación de Schrödinger para la función $f(z) = f_{fast}(z)$, se transforma a una forma que corresponde al problema bien conocido para un pozo cuántico con las condiciones de frontera abruptos:

$$-\frac{d}{dz} \left[\eta(z) \frac{df(z)}{dz} \right] + V_{conf}(z) f(z) = E_{fast}(h) f(z); \quad (11)$$

$$V_{conf}(z) = V_0 [\theta(-z) + \theta(z-h)]; \quad V_0 = 0.6 (E_g^{(b)} - E_g^{(w)}) / Ry^*$$

La ecuación (11) describe el movimiento del electrón en la dirección Z con dos coordenadas polares (ρ, φ) “congeladas” y el ancho del pozo h está asociado con el grosor de la capa delgada en el punto congelado $h = h(\rho, \varphi)$, la relación dada por la fórmula (6). Los menores valores propios del problema de contorno (11) correspondientes al estado base, encontrados para diferentes valores h que definen la función $E_{fast}(h)$, la cual se utiliza en el segundo paso de la AA como un potencial adiabático:

$$V_{ad}(\rho, \varphi) = E_{fast}(H(\rho, \varphi)) \quad (12)$$

En el segundo paso de la AA “se descongela” el movimiento lento en la dirección lateral y se resuelve la ecuación diferencial bidimensional en las coordenadas polares:

$$\left[-\Delta_{\rho, \varphi} + V_{ad}(\rho, \varphi) + V_m(\rho, \varphi) + V_e(\rho, \varphi) \right] \Phi(\rho, \varphi) = E \Phi(\rho, \varphi) \quad (13)$$

Finalmente, al resolver la ecuación (13) se encuentran los valores propios E , los cuales definen el espectro energético de un clúster de QDs. A continuación, se describen los algoritmos usados para realizar esto dos pasos de la AA.

3.5 ANÁLISIS DEL MOVIMIENTO RÁPIDO EN LA DIRECCIÓN TRANSVERSAL

La forma de la ecuación (11) para el movimiento rápido a lo largo de eje Z se simplifica al realizar un desplazamiento del origen según la formula $z \rightarrow z + h/2$, que transforma esta ecuación para un pozo cuántico con el potencial dado por una

función par $V(z) = V_0 \delta(|z| - h/2)$. De esta manera la función de onda del estado base también es una función par y satisface dentro del pozo, a la ecuación armónica

$$-f_I''(z) = E_{fast} f_I(z); \quad |z| < h/2; \quad E_{fast} > 0 \quad (14)$$

Esta misma ecuación fuera del pozo se transforma en una ecuación de decaimiento cuyas soluciones son funciones exponenciales

$$\frac{m_w}{m_b} f''(z) = -(V_0 - E_{fast}) f(z); \quad |z| > h/2; \quad E_{fast} < V_0 \quad (15)$$

Como la masa efectiva en los puntos $z = \pm h/2$ tiene un salto (se varía desde m_w en el pozo hasta m_b en la barrera la función de onda del estado base debe satisfacer la condición de Ben Daniel- Duke⁴⁴:

$$f'(h/2-0)/f(h/2-0) = \frac{m_w}{m_b} f'(h/2+0)/f(h/2+0) \quad (16)$$

La solución de la ecuación (15) correspondiente al estado base (función par) es:

$$f\left(\frac{h}{2}-0\right) = A \cos\left(\frac{h}{2} \sqrt{E_{fast}}\right); \quad f\left(\frac{h}{2}+0\right) = B \exp\left(-\frac{h}{2} \sqrt{\frac{m_b}{m_w}} (V_0 - E_{fast})\right) \quad (17)$$

⁴⁴ HARRISON, Paul. Quantum wells, wires and dots. John Wiley & Sons, 2001.

Sustituyendo (17) en (16) se obtiene la siguiente ecuación trascendente para la energía del movimiento rápido del electrón a lo largo del eje Z:

$$\tan\left(\frac{h}{2}\sqrt{E_{fast}}\right) = \sqrt{\frac{m_w}{m_b}(V_0 - E_{fast})} \quad (18)$$

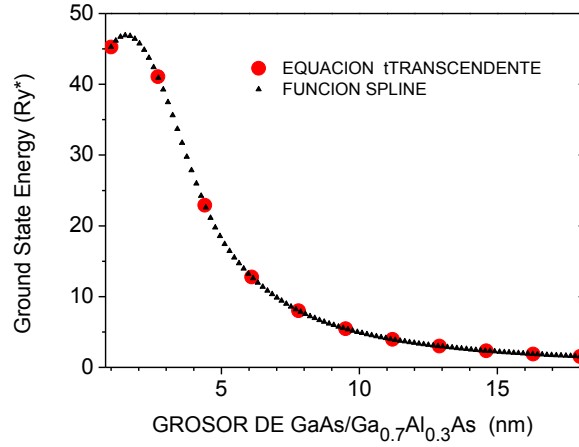
Para solucionar esta ecuación numéricamente, para la energía más baja E_{fast} en función del grosor h se ha encontrado usando el programa estándar ZEROIN.

3.6 POTENCIAL ADIABÁTICO PARA EL MOVIMIENTO 2D EN EL PLANO HORIZONTAL

Las soluciones $E_{fast}^{(i)}$, $i = 1, 2, \dots, 11$ de la ecuación (18) fueron obtenidas numéricamente usando el programa “ZEROIN” para 11 diferentes valores de h_i , $i = 1, 2, \dots, 11$, h_i desde 0 hasta 20nm. Estos resultados posteriormente fueron utilizados para construir una función interpolante polinomial $E_{fast}(h)$, usando los splines cúbicos como funciones de base y los programas estándares “SPLINE” y “SEVAL”.

En la figura 13, se muestran los resultados del cálculo de la solución de la ecuación trascendente (círculos grandes en rojo) y los puntos calculados con la función interpolante (triángulos en negro). Se ve una excelente concordancia y por eso, de ahora en adelante en la programación, se considera que la dependencia de la energía $E_{fast}(h)$, con el valor del grosor h de la película, como una función estándar definida en nuestra biblioteca.

Figura 13. La energía del estado base en función del grosor de una película delgada de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3}As. Círculos grandes muestran los resultados obtenidos al resolver la ecuación trascendente y los puntos son dados por la función interpolante polinomial



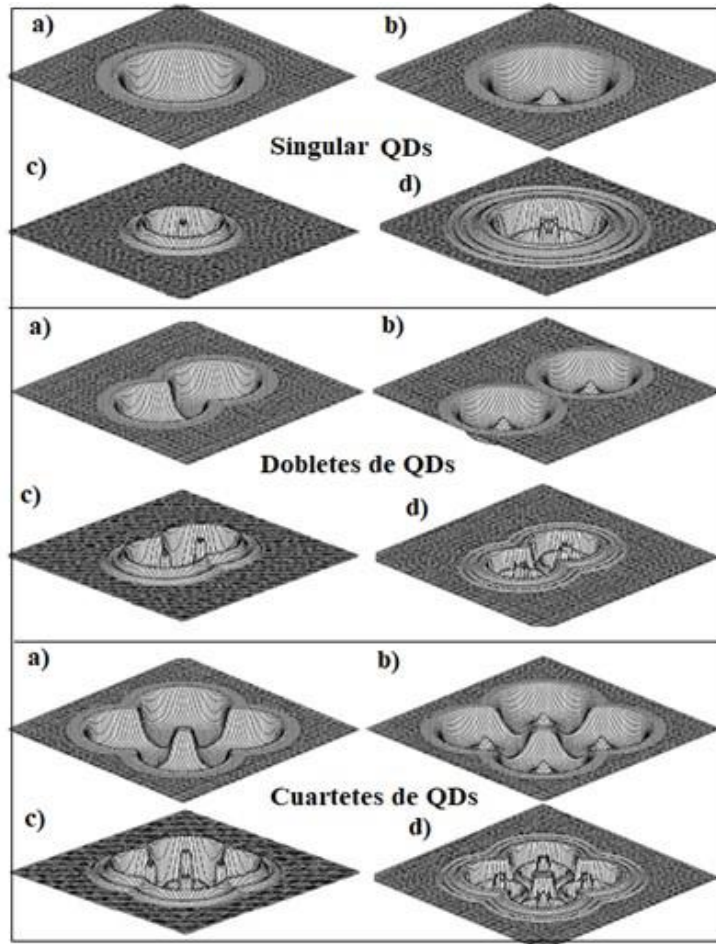
Una vez definida esta función en la biblioteca, se puede encontrar el potencial adiabático como una función compuesta usando la fórmula (6) para los perfiles de los clústeres de uno, dos y cuatro QDs:

$$E_{ad}(\rho, \varphi) = E_{fast}(h); \quad h = h(\rho, \varphi) = h \left(\sqrt{(\rho |\cos \varphi| - a_x)^2 + \eta^2 (\rho |\sin \varphi| - a_y)^2} \right) \quad (19)$$

Este potencial adiabático presenta el potencial de confinamiento geométrico para el movimiento de un electrón en un clúster de QDs con diferentes perfiles. El potencial (19) junto con los potenciales externos generados por campos eléctrico y magnético, define el espectro energético y las propiedades electrostáticas y magnetostáticas de un clúster de QDs

En la Figura 14 se presentan imágenes de clústeres de QDs con diferentes perfiles que consisten de un QD, de un doblete y un cuartete. Se puede ver que el potencial adiabático depende fuertemente tanto de morfología individual de QD como de la cantidad de los QDs que comprende un clúster. Es importante para los espectros energéticos, el cambio de la simetría de la geometría y respectivamente del potencial adiabático, con el incremento del número de QDs en el clúster. La simetría axial en un QD, se transforma en las simetrías C_2 y C_4 en un doblete y en un cuartete, respectivamente, como se puede ver en Figura 14

Figura 14. Imágenes de potenciales adiabáticos para QDs singulares, dobletes y cuartetos con perfiles a) de una lente, b) un anillo singular, c) un anillo doble y d) un anillo triple, correspondientes a las imágenes presentados en la Figura 5.



4. MOVIMIENTO LENTO EN EL PLANO DE UNA CAPA DELGADA

4.1 EL MÉTODO DE GALERKIN PARA LA ECUACIÓN DE SCHRÖDINGER EN COORDENADAS POLARES

Al considerar la ecuación de onda que describe el movimiento de un electrón dentro una región circular de radio R_F lo suficientemente grande, como para que sea válida la aproximación que establece que la función de onda en la frontera es cero. El problema de contorno correspondiente tiene la forma:

$$\begin{aligned} H(\rho, \varphi) |\psi(\rho, \varphi)\rangle &= E |\psi(\rho, \varphi)\rangle; \quad 0 < \varphi < 2\pi; \quad 0 < \rho < R_F; \\ \psi(\rho, 0) &= \psi(\rho, 2\pi); \quad \psi(R_F, \varphi) = 0 \end{aligned} \quad (20)$$

El Hamiltoniano en presencia de un campo magnético dirigido a lo largo de eje Z y definido por el parámetro adimensional γ y de un campo eléctrico dirigido a lo largo de eje X y definido por el parámetro adimensional α , es igual a:

$$\hat{H}(\rho, \varphi) = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \alpha \rho \cos \varphi + V_{\text{conf}}(\rho, \varphi) \quad (21)$$

La solución del problema de Sturm-Liouville (20), para el Hamiltoniano (21), se buscó en una forma de series de Fourier truncada con M armónicas incluidas.

$$|\psi(\rho, \varphi)\rangle = \sum_{m=-M}^M |f_m(\rho)\rangle |\phi_m(\varphi)\rangle; \quad |\phi_m(\varphi)\rangle = e^{im\varphi} / \sqrt{2\pi} \quad (22)$$

La combinación lineal de los estados con diferentes momentos angulares m , en la expansión (22), refleja la posibilidad de un enredo de estos estados en presencia

de potenciales asimétricos, en particular del potencial de confinamiento $V_{cnf}(\rho, \varphi)$. Con esta combinación lineal se asocia a continuación un vector de discrepancias $|D(\rho, \varphi)\rangle$ definido en el espacio de Hilbert con funciones de base ortonormales $|\phi_m(\varphi)\rangle$ como:

$$|D(\rho, \varphi)\rangle = (\hat{H}(\rho, \varphi) - E)|\psi(\rho, \varphi)\rangle = \sum_{m=-M}^M (\hat{H}(\rho, \varphi) - E)|f_m(\rho)\rangle |\phi_m(\varphi)\rangle \quad (23)$$

Al utilizar la siguiente identidad:

$$\left(-\Delta_\rho + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} - i\gamma \frac{\partial}{\partial \varphi} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) |\phi_m(\varphi)\rangle = |\phi_m(\varphi)\rangle \left(-\Delta_\rho + \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} + \gamma m \right)$$

La expresión explícita para la discrepancia adquiere la forma

$$|D(\rho, \varphi)\rangle = \sum_{m=-M}^M \left[\left(-\Delta_\rho + V_{eff}(\rho, \varphi) - E \right) |\phi_m(\varphi)\rangle \right] |f_m(\rho)\rangle; \quad (24)$$

$$V_{eff}(\rho, \varphi) = \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} + \gamma m + \alpha \rho \cos \varphi + V_{cnf}(\rho, \varphi)$$

En la expresión (24), el vector de discrepancia depende de la selección de las funciones de prueba $f_m(\rho)$ incógnitas, características del enredo de los estados con diferentes momentos angulares. Para escogerlos de manera óptima en el método de Galerkin, se sugiere que todas las proyecciones del vector de discrepancias (24) sobre las funciones de base del subespacio de Hilbert escogido, deben ser iguales a cero, es decir:

$$\langle \phi_{m'}(\varphi) | D(\rho, \varphi) \rangle = \sum_{m=-M}^M \langle \phi_{m'}(\varphi) | \left[\left(-\Delta_\rho + V_{eff}(\rho, \varphi) - E \right) f_m(\rho) \right] |\phi_m(\varphi)\rangle \rangle = 0; \quad m' = (-M, +M) \quad (25)$$

Teniendo en cuenta la ortogonalidad de las funciones de base, se obtiene inmediatamente la siguiente ecuación secular:

$$\sum_{m'=-M}^M \left[(-\Delta_\rho - E) \delta_{m,m'} + V_{m,m'}(\rho) \right] f_{m'}(\rho) = 0; \quad m = (-M, +M); \quad 0 < \rho < R_F; \quad f_m(R_F) = 0 \quad (26)$$

En esta expresión los elementos matriciales $V_{m,m'}$ de una matriz $\mathbf{V}$ en (25a) se definen como:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{m,m'} = V_{m,m'}(\rho) = & \left(\frac{\gamma^2 \rho^2}{4} + \frac{m^2}{\rho^2} + \gamma m \right) \delta_{m,m'} \\ & + \frac{\alpha \rho}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} \cos \varphi d\varphi + \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} V_{cnf}(\rho, \varphi) d\varphi \end{aligned} \quad (27)$$

Por otro lado, la ecuación secular (25) presenta un sistema de $2M+1$ ecuaciones lineales el cual se puede representar en la siguiente forma matricial:

$$\begin{aligned} & \left[\left(-\Delta_\rho + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} - E \right) \mathbf{I} + \hat{\mathbf{V}}(\rho) \right] \mathbf{f}(\rho) = 0; \quad \mathbf{f}_m(\rho) = f_m(\rho); \quad \hat{\mathbf{V}}(\rho) = \text{Re } \hat{\mathbf{V}}(\rho) + i \text{Im } \hat{\mathbf{V}}(\rho); \\ & \text{Re } \hat{\mathbf{V}}_{m,m'}(\rho) = \left(\frac{m^2}{\rho^2} + \gamma m \right) \delta_{m,m'} + \frac{\alpha \rho}{2} (\delta_{m,m'+1} + \delta_{m,m'-1}) + V_C(m - m', \rho); \\ & \text{Im } \hat{\mathbf{V}}(\rho) = V_S(m - m', \rho) \quad m, m' = -M, M \\ & V_C(k, \rho) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \cos k\varphi \cdot V_{cnf}(\rho, \varphi) d\varphi; \quad V_S(k, \rho) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \sin k\varphi \cdot V_{cnf}(\rho, \varphi) d\varphi; \\ & V_C(-k, \rho) = V_C(k, \rho); \quad V_S(-k, \rho) = -V_S(k, \rho); \quad k = 0, 1, \dots, 2M \end{aligned} \quad (28)$$

4.2 SEPARACIÓN DE COORDENADAS POLARES

Para desacoplar el sistema de ecuaciones (28) se utilizó la transformación canónica $\hat{\mathbf{T}}(\rho)$ de dimensión $2M+1$ que permitio diagonalizar la matriz $\hat{\mathbf{V}}(\rho)$

$$\mathbf{f}(\rho) = \hat{\mathbf{T}}(\rho) \tilde{\mathbf{f}}(\rho) \quad (29)$$

Se escogió la matriz de transformación $\hat{\mathbf{T}}(\rho)$ de tal manera de que ella diagonaliza la matriz $\hat{\mathbf{V}}(\rho)$, es decir:

$$\hat{\mathbf{V}}(\rho) \hat{\mathbf{T}}(\rho) = \lambda(\rho) \hat{\mathbf{T}}(\rho) \Rightarrow \hat{\mathbf{T}}^{-1}(\rho) \hat{\mathbf{V}}(\rho) \hat{\mathbf{T}}(\rho) = \lambda(\rho) \mathbf{I} \quad (30)$$

Esta ecuación corresponde al problema de valores y vectores propios para la matriz $\hat{\mathbf{V}}(\rho)$, la cual puede solucionarse en dos pasos. El primer paso consiste en la búsqueda de los $2M+1$ valores propios resolviendo la siguiente ecuación secular

$$\det[\hat{\mathbf{V}}(\rho) - \lambda_k(\rho) \mathbf{I}] = 0 \quad k = 1, 2, \dots, 2M + 1 \quad (31)$$

Una vez son encontrados los valores propios $\lambda_k(\rho)$, para cada uno de ellos, en el segundo paso se encuentran los vectores propios al resolver el siguiente sistema de ecuaciones lineales

$$[\hat{\mathbf{V}}(\rho) - \lambda_k(\rho)] \tilde{\mathbf{t}}_k(\rho) = 0; \quad k = 1, 2, \dots, 2M + 1 \quad (32)$$

El conjunto de vectores propios $\tilde{\mathbf{t}}_k(\rho)$ agrupados, conforman finalmente la matriz de la transformación canónica $\hat{\mathbf{T}}(\rho)$.

Con base en las definiciones anteriores, se propuso el siguiente procedimiento numérico para desacoplar el sistema de $2M+1$ ecuaciones diferenciales (31):

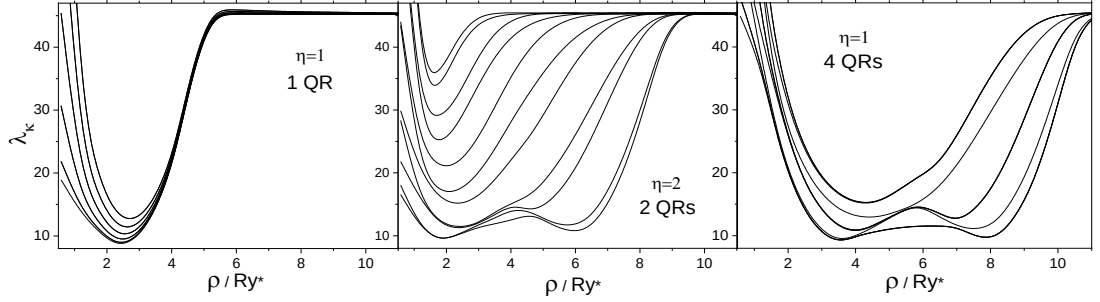
- 1) Dentro del intervalo $0 < \rho < R_F$ se escoge una malla con los nodos $0 < \rho_i < R_F, i=1,2,\dots,ns$
- 2) Para cada nodo de la malla $\rho_i, i=1,2,\dots,ns$ se resuelve el problema de valores propios (31) y se encuentran los $2M+1$ valores propios $\lambda_k(\rho_i); k=1,2,\dots,2M+1$
- 3) Para cada valor propio $\lambda_k(\rho_i); k=1,2,\dots,2M+1$ definido sobre ns nodos de la malla se construye un interpolador polinomial $\lambda_k(\rho)$ en la base de las funciones de splines cúbicos
- 4) Usando el método de barrido trigonométrico (la descripción del método está dada en la siguiente sección) para cada una de estas funciones $\lambda_k(\rho)$, se resuelve por separado el siguiente problema de contorno unidimensional.

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} + \lambda_k(\rho) - E \right] \tilde{f}_k(\rho) = 0; 0 < \rho < R_F; \tilde{f}_k(R_F) = 0; k=1,2,\dots,2M+1$$

(33)

La ecuación (33) describe los movimientos en la dirección radial para $2M+1$ diferentes estados rotacionales, y la función $\lambda_k(\rho)$ juega un papel de *un potencial radial efectivo* que tiene en cuenta los efectos relacionados tanto con la fuerza centrífuga como con fuerzas eléctricas y magnéticas. En la figura 15 se presentan algunos ejemplos de funciones $\lambda_k(\rho)$ para un QR y clústeres de dos y cuatro QRs, calculados usando nuestro algoritmo.

Figura 15. Curvas de funciones $\lambda_k(\rho)$ correspondientes a los potenciales radiales efectivos para diferentes estados rotacionales en un QR, en un doblete y en un cuartete.



Se puede observar en la figura 15, una modificación esencial de las curvas de los potenciales efectivos para diferentes estados rotacionales a medida que se incrementa el número de QDs en un clúster. Este cambio, por un lado, está relacionado con el incremento de la dimensión del clúster, y por otro, con el cambio de la simetría de la estructura. El incremento de la dimensión del clúster, conduce al aumento del ancho del pozo de potencial y a la aparición del segundo mínimo. Adicionalmente, al pasar desde la estructura con un solo QR hacia las estructuras con dos y cuatro QRs, la simetría inicialmente se disminuye ($C_\infty \rightarrow C_2$) y después crece ($C_2 \rightarrow C_4$). En la figura 15, se ve que siendo menor la simetría, mayor es desdoblamiento de las curvas de potencial. Ambos factores influyen esencialmente en el espectro energético de los clústeres de QDs y afecta las propiedades ópticas, eléctricas y magnéticas de una nanoestructura.

4.3 MÉTODO DE BARRIDO TRIGONOMÉTRICO

El problema de contorno para la ecuación diferencial (33) involucra dos condiciones en las fronteras, una consiste en la sugerencia que en el origen la función debe ser finita, es decir $f_k(0) < \infty$ y otra consiste en la condición que esta función debe anularse en las regiones periféricas, es decir $f_k(R_F) = 0$. De esta manera el problema de contorno para el espectro de energías discretas tiene la siguiente forma explícita:

$$f_{nk}''(\rho) + \frac{1}{\rho} f_{nk}'(\rho) + \left[E_{nk} - \lambda_k(\rho) - \frac{\gamma^2 \rho^2}{4} \right] f_{nk}(\rho) = 0; \quad 0 < \rho < R_F; \quad (34)$$

$$f_{nk}(0) < \infty; \quad f_{nk}(R_F) = 0; \quad k = 1, 2, \dots, 2M + 1; \quad n = 1, 2, \dots$$

Las soluciones del problema de contorno (34), dependen de dos números cuánticos: n , el número cuántico radial y k , el número cuántico rotacional, que corresponde a diferentes estados con los momentos angulares enredados. El segundo término en la ecuación (34) tiene la singularidad en el origen y una ambigüedad. Para eliminarla se hace la sustitución $f_{nk}(\rho) = \chi(\rho)/\sqrt{\rho}$, que permite reducir el problema (34) a una forma estándar de la ecuación de Schrödinger para el movimiento de una partícula dentro un intervalo unidimensional finito:

$$\chi_{nk}''(\rho) + [E_{nk} - V_k(\rho)] \chi_{nk}(\rho) = 0; \quad \chi_{nk}(0) = 0; \quad \chi_{nk}(R_F) = 0 \quad (35)$$

$$V_k(\rho) = \lambda_k(\rho) + \frac{1}{4} \left(\gamma^2 \rho^2 + \frac{1}{\rho^2} \right); \quad f_{nk}(\rho) = \frac{\chi_{nk}(\rho)}{\sqrt{\rho}}$$

Para resolver el problema de contorno se aplicó el método de barrido trigonométrico, descrito a continuación⁴⁵. El primer paso de este método consiste en la reducción

⁴⁵ CHAKRABORTY, Tapash and PIETILÄINEN, Pekka. Electron-electron interaction and the persistent current in a quantum ring. *Physical Review B*, 1994, vol. 50, no 12, p. 8460.

de la ecuación diferencial de segundo orden a una de primer orden, usando la siguiente sustitución:

$$\chi_{nk}(\rho) = A_k(\rho)\cos\theta(\rho); \quad \chi_{nk}'(\rho) = A_k(\rho)\sin\theta(\rho) \quad (36)$$

En esta sustitución se está tratando de reemplazar dos funciones incógnitas $f_k(\rho)$ y $f_k'(\rho)$ por otro par de funciones, la amplitud $A_k(\rho)$ y la fase $\theta(\rho)$. Sustituyendo las expresiones (36) en la ecuación diferencial (35), se obtiene

$$A_k'(\rho)\sin\theta(\rho) + A_k(\rho)\cos\theta(\rho) \cdot \theta'(\rho) + [E_{nk} - V_k(\rho)]A_k(\rho)\cos\theta(\rho) = 0 \quad (37)$$

Esta ecuación comprende dos funciones incógnitas, la amplitud y la fase. Para excluir desde esta igualdad la amplitud $A_k(\rho)$, se deriva la primera identidad (36) respecto de ρ , y, sustituye el resultado obtenido en la segunda ecuación (36):

$$\begin{aligned} A_k'(\rho)\cos\theta(\rho) - A_k(\rho)\sin\theta(\rho) \cdot \theta'(\rho) &= A_k(\rho)\sin\theta(\rho) \Rightarrow \\ \Rightarrow A_k'(\rho) &= A_k(\rho) \frac{\sin\theta(\rho)}{\cos\theta(\rho)} [\theta'(\rho) + 1] \end{aligned} \quad (38)$$

Finalmente, se sustituye la expresión para $A_k'(\rho)$ obtenida en (37) y al cancelar la amplitud $A_k(\rho)$ se obtiene la ecuación diferencial de primer orden para la fase $\theta(\rho)$

$$\theta'(\rho) = -\left\{\sin^2\theta(\rho) + [E_{nk} - V_k(\rho)]\cos^2\theta(\rho)\right\}; \quad 0 < \rho \leq R_F; \quad \theta(0) = \frac{\pi}{2};$$

(39a)

$$V_k(\rho) = \lambda_k(\rho) + \frac{1}{4} \left(\gamma^2 \rho^2 + \frac{1}{\rho^2} \right)$$

(39b)

La condición en (39a), $\theta(0)=\pi/2$ según la definición (38) conduce a la igualdad $\chi_{nk}(0)=0$. Según la ecuación (39a), entre dos puntos de retorno donde $E-V_k(\rho)>0$, la derivada $\theta'(\rho)<0$. Por eso, la función $\theta(\rho)$ es decreciente y a partir del valor $\theta(0)=\pi/2$ decrece paulatinamente hasta llegar a los valores $-\pi/2, -3\pi/2, -5\pi/2, \dots$ en el punto $\rho=R_F$, para los estados $n=1, 2, 3, \dots$, respectivamente.

De esta manera, el cambio de variables ha permitido reducir el problema de contorno (36) de una ecuación diferencial de segundo orden a un problema de Cauchy para una ecuación diferencial de primer orden (36), la cual tiene una solución única, además existen algoritmos bien desarrollados para resolver este problema numéricamente. Para realizar los cálculos se utilizó el código del programa RKF45. Hay que anotar que las energías buscadas E_{nk} entran en el problema (40) como un parámetro y por eso la solución del problema (1) se encuentra como una función de dos variables $\theta=\theta(\rho, E_{nk})$. Esta función además debe satisfacer la segunda condición de frontera $f_{nk}(R_F)=0$ o $\chi_{nk}(R_F)=\sqrt{R_F} f_{nk}(R_F)=0$ Como consecuencia según la definición (38) debe cumplirse la condición $\cos\theta(R_F, E_{nk})=0$. Además, de acuerdo con la ecuación diferencial (40) la derivada $\partial\theta(\rho, E_{nk})/\partial\rho<0$, es decir es negativa, entonces $\theta=\theta(\rho, E_{nk})$ es una función decreciente y por eso $\theta(R_F, E_{nk})<\theta(0, E_{nk})=\pi/2$. Todo lo anterior conduce a la condición:

$$\theta(R_F, E_{nk})=\pi/2-\pi\cdot n; \quad n=1, 2, \dots; \quad k=1, 2, \dots, 2M+1 \quad (40)$$

La ecuación (40) puede considerarse como una ecuación transcendente respecto a los valores incógnitos de las energías E_{nk} y el número entero n como un número cuántico radial para diferentes niveles energéticos. En un procedimiento numérico para encontrar las energías E_{nk} , primero se debe definirse una función externa

$$Fun(E) = \theta(R_F, E) - \pi/2 + \pi \cdot n; \quad n = 1, 2, \dots$$

Como una solución del problema de Cauchy (40) en el punto final $\rho = R_F$ y posteriormente resolver la ecuación transcendente $Fun(E)$ usando uno de los códigos estándares.

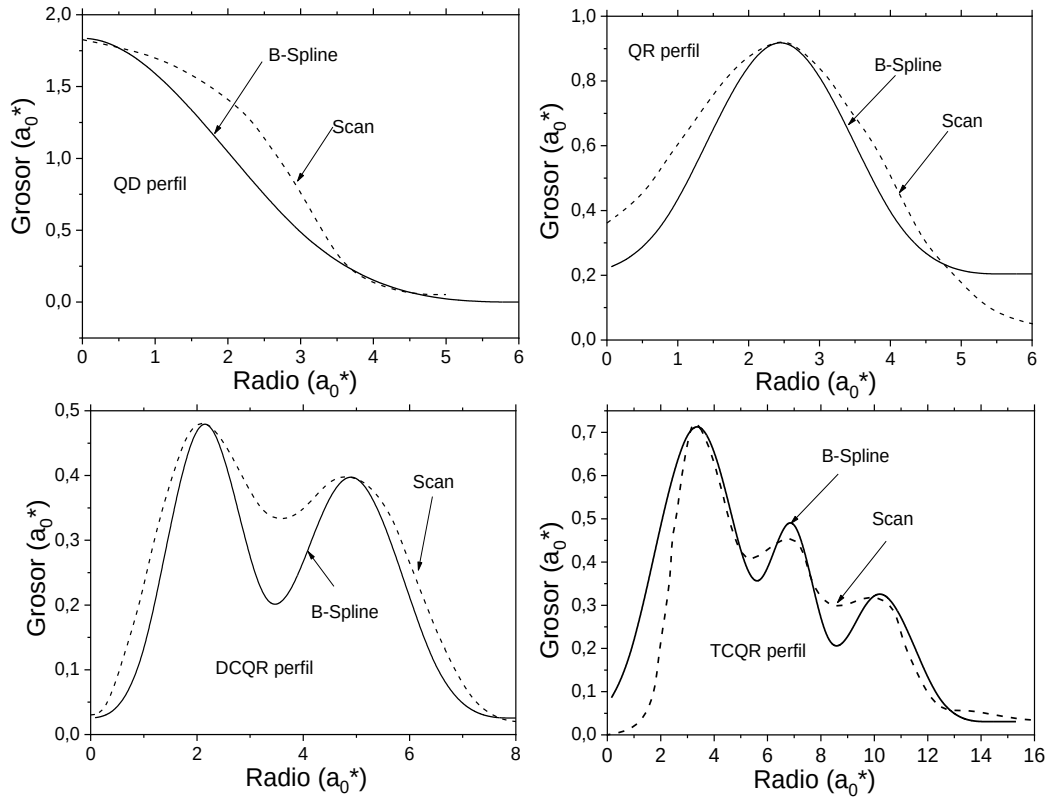
5. RESULTADOS Y DISCUSION

5.1 SIMULACIÓN DE LA MORFOLOGÍA Y PROCEDIMIENTO NUMÉRICO

Antes de presentar los resultados de los cálculos, se describirá brevemente el procedimiento numérico utilizado para obtenerlos. En el primer paso del análisis del espectro energético de un clúster, se define el perfil de un QD singular, definido como una función que describe dependencia del grosor h del QD, en función de la distancia r hasta el centro del QD a lo largo de una corte vertical, $h = h_{\text{grosor}}(r)$. Los cálculos se analizaron con cuatro perfiles diferentes: de un QD, un QR, un DCQR y un TCQR, escogidos como un ejemplo de las nanoestructuras correspondientes, cuya fabricación y escaneos experimentales fueron reportados en las publicaciones recientes. Para simular sus perfiles, se digitalizaron las curvas experimentales y se encontraron los polinomios interpolantes, correspondientes para cada uno. Los resultados de la interpolación a partir de los datos experimentales y la comparación con los escaneos experimentales para cada estructura son presentados en la figura 5. Otra manera de representar los perfiles es la utilización de las funciones analíticas, que se ajustan bien a los escaneos experimentales. Con este fin se utilizó B-splines cúbicos. En la figura 16, se representan con curvas de trazos, los perfiles escaneados experimentalmente, referenciados en Fig. 5, y con curvas solidas la aproximación mediante B-splines cúbicos, definidos analíticamente.

En el trabajo computacional se han realizado los cálculos para ambas representaciones y se ha encontrado, que los resultados obtenidos difieren ligeramente, pero el cálculo con las funciones de B-splines es significativamente mucho más rápido y mucho más estable. Teniendo en cuenta que los escaneos incluyen errores en mediciones y además que las dimensiones de puntos cuánticos tienen una variación hasta de un 20%, la utilización de las expresiones aproximadas para los perfiles experimentales puede considerarse justificable.

Figura 16. Perfiles de los cortes a lo largo de eje X de puntos cuánticos aislados axialmente simétricos con las morfologías de QD, QR, DCQR y TCQR escaneados experimentalmente (curvas a trazos) y perfiles aproximados mediante B-splines (curvas sólidas)

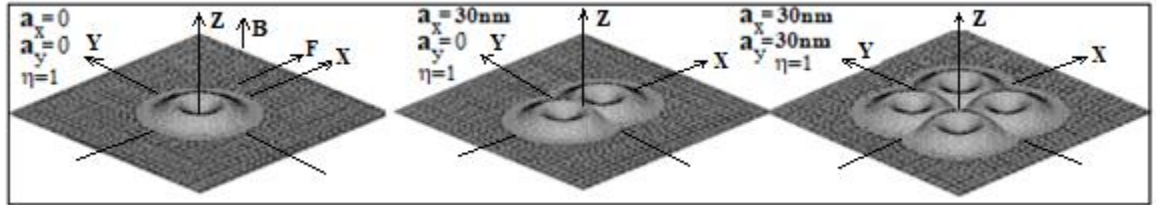


Una vez está definida la función $h = h_{\text{grosor}}(r)$, que define la variación del grosor en la dirección radial de los puntos cuánticos aislados, se puede programar la dependencia del grosor de una película delgada, no solo con un QD sin con clústeres de dos y cuatro QDs si se utiliza la siguiente relación del grosor de la película (en la dirección Z) con las coordenadas polares ρ, φ .

$$h(\rho, \varphi) = h_{\text{grosor}} \left(\sqrt{(\rho |\cos \varphi| - a_x)^2 + \eta^2 (\rho |\sin \varphi| - a_y)^2} \right) \quad (41)$$

Aquí a_x y a_y son las separaciones entre los centros de los QDs en las direcciones X y Y , respectivamente, mientras que η es un parámetro que caracteriza la anisotropía de la estructura. Si en (41) se aceptan los valores $a_x = a_y = 0$, entonces esta fórmula describe solo un QD, si $a_x \neq 0$ y $a_y = 0$ entonces dos QDs y si $a_x \neq 0$ y $a_y \neq 0$, cuatro QDs como se muestra en figura 17 para una morfología particular de un QR.

Figura 17. Imágenes de capas delgadas con un solo QR y clústeres de dos y cuatro QRs, cuyas morfologías están definidas por la fórmula (41) con la función de corte $h = h_{\text{grosor}}(r)$, representadas en la figura 16.



A continuación, se presentan los resultados del cálculo de los espectros energéticos de los QDs con diferentes morfologías y diferentes tamaños de clústeres en función del campo magnético. El interés en el análisis de la dependencia del espectro energético de la intensidad de campo magnético en nanoestructuras tipo de QDs, está relacionada con la posibilidad del cambio de la conectividad topológica de estas estructuras, al formarse un hueco central en los QDs en el proceso de fabricación y la aparición de corrientes circulares inducidas en la presencia del campo magnético externo. Un conjunto de estas propiedades relacionadas con el cambio de la conectividad topológica inducidas por la aplicación de un campo magnético externo se llama efecto de Aharonov –Bohm, que hasta ahora han sido bien estudiado para

los QRs aislados^{46, 47}. En un clúster de QRs la conectividad topológica depende fuertemente de la cantidad comprendida en el clúster y del solapamiento entre ellos y uno puede esperar cambios significativos de las propiedades magnéticas en este tipo de nanoestructuras.

En los resultados, que se presentan a continuación, las energías E_{nk} se calcularon como las raíces de la ecuación trascendente (40) para diferentes números cuánticos n y k y diferentes valores de campo magnético γ . La dependencia $E_{nk} = E_{nk}(\gamma)$ para cada uno estos estados define los parámetros de la estructura, el momento magnético p_m y la susceptibilidad magnética χ_m dados por las siguientes relaciones:

$$p_m = -dE_{nk}(\gamma)/d\gamma; \quad \chi_m = d^2E_{nk}(\gamma)/d\gamma^2 \quad (42)$$

Se analizó para los puntos cuánticos con diferentes morfologías la influencia de la morfología, la anisotropía de los QDs y el número de los QDs que conforman el clúster, y del campo eléctrico externo, sobre sus espectros energéticos y sobre las propiedades magnéticas.

5.2 EFECTO DE LA MORFOLOGÍA Y DE LA CLUSTERIZACIÓN

Se inicia el análisis de los espectros de clústeres con la descripción de los resultados obtenidos para los conjuntos de dos y cuatro QDs en forma de lentes. En este caso las regiones de confinamiento del electrón son tridimensionales y

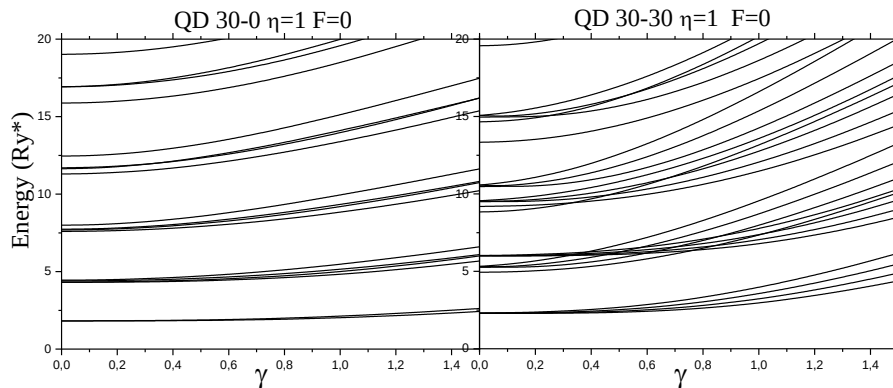
⁴⁶ BRACKER, A. S.; STINAFF, E. A.; GAMMON, D.; WARE, M. E.; TISCHLER, J. G.; PARK, D... and RIVA, C. Binding energies of positive and negative trions: From quantum wells to quantum dots. *Physical Review B*, 2005, vol. 72, no 3, p. 035332.

⁴⁷ KLEEMANS, N. A.; BOMINAAR-SILKENS, I. M.; FOMIN, V. M.; GLADILIN, V. N.; GRANADOS, D.; TABOADA, A. G... and MAAN, J. C. Oscillatory persistent currents in self-assembled quantum rings. *Physical review letters*, 2007, vol. 99, no 14, p. 146808.

simplemente conectadas topológicamente. El cambio de la energía del electrón en la presencia de un campo magnético aplicado en la dirección del crecimiento de cristal se debe, por un lado, al efecto diamagnético y por otro lado, al efecto paramagnético. El primer efecto está relacionado con la interacción del campo magnético con la corriente inducida por el mismo. Este efecto siempre conduce al incremento de la energía del electrón (ley de Lenz) y el valor de este *incremento es proporcional al cuadrado del campo*. Al contrario, la dependencia del aporte a la energía del electrón del efecto paramagnético con el valor del campo es *lineal* siempre y cuando el valor del momento angular no está afectado por el confinamiento diamagnético. Esta afirmación es cierta, por ejemplo, en el caso cuando el movimiento de un electrón está confinado dentro de un anillo muy delgado. El efecto paramagnético solo afecta los estados con los momentos angulares diferentes de cero y produce un incremento de la energía del electrón si las direcciones de campo magnético y del momento angular son opuestas y una disminución si las direcciones son paralelas.

En la figura 18, se muestran los resultados del cálculo de las energías del electrón en función del campo magnético aplicado en la dirección del crecimiento del cristal, en una capa delgada con dos QDs (a la izquierda) y cuatro QDs (a la derecha), idénticos QDs en forma de una lente circular ($\eta=1$).

Figura 18. Energías de clústeres de dos QDs (a la izquierda) y cuatro QDs (a la derecha) en función del campo magnético.



Se puede observar que para todos los niveles energéticos las curvas muestran una dominancia del efecto diamagnético (cuadrático) frente al efecto paramagnético (lineal).

Comparando las curvas en la Figura 18, para dos clústeres con diferentes números de QDs, se pueden ver dos cambios significativos en el espectro energético, producidos con el incremento de campo magnético; primero, el crecimiento de las energías inicialmente en forma parabólica y para valores grandes del campo presenta una asíntota casi lineal, y segundo, un desacoplamiento de los niveles en unos dobletes en el caso de dos QDs y en unos cuartetos en el caso de 4QDs. El primer cambio de las energías es típico para el efecto diamagnético, el cual generalmente tiene un carácter similar tanto en QDs singulares como en clústeres. El segundo efecto, está relacionado directamente con la clusterización y solapamiento de QDs. Este efecto es muy interesante ya que ofrece una herramienta experimental para analizar las propiedades de clústeres de QDs.

La explicación del efecto de formación de unos grupos de subniveles desacoplados en grupos de dos y cuatro en la presencia de un campo magnético, puede darse, analizando las curvas de los potenciales radiales efectivos, para los diferentes estados rotacionales presentados en la Figura 15. Como fue explicado anteriormente, en un clúster la simetría axial se rompe y los estados con diferentes momentos angulares se enredan, lo que resulta, como se puede ver en la figura 15, en la aparición de dos mínimos en la curva de potencial radial, formando un doble pozo de la misma o casi la misma profundidad. En consecuencia, todos los niveles energéticos para un movimiento en la dirección radial están dos o cuatro veces degenerados, correspondiendo a las rotaciones con la misma energía, pero a dos diferentes distancias desde el centro de rotación. Pero cuando el campo magnético crece, uno de los dos mínimos, el que se encuentra más lejos del centro de rotación, sube, haciendo bajar el confinamiento diamagnético en el pozo correspondiente a este mínimo menos profundo. En consecuencia, los niveles se desdoblan,

formando unos dobletes o unos cuartetos para dos y cuatro QDs respectivamente. Entre mayor sea el número de QDs en un clúster, mayor es el número de subniveles en que se desdoblan los niveles individuales correspondientes a un QD aislado.

En la primera columna de la figura 19, se presentan las curvas similares para anillos cuánticos con diferentes geometrías; QR-circular con un solo borde, DCQR –con dos bordes, circulares concéntricos y TCQR - con tres bordes circulares concéntricos. En la segunda y tercera columnas se presentan los gráficos de las energías en función del campo magnético para los clústeres correspondientes con dos y cuatro anillos, respectivamente. Comparando las curvas en las figuras 18 y 19 se pueden ver dos diferencias esenciales. Primero, todas curvas en la figura 18 son monótonas, mientras que en la figura 19 las curvas en la primera columna tienen un carácter oscilatorio y, segundo, las curvas en la figura 19 tienen a diferencia de las mostradas en la figura 18, múltiples cruces.

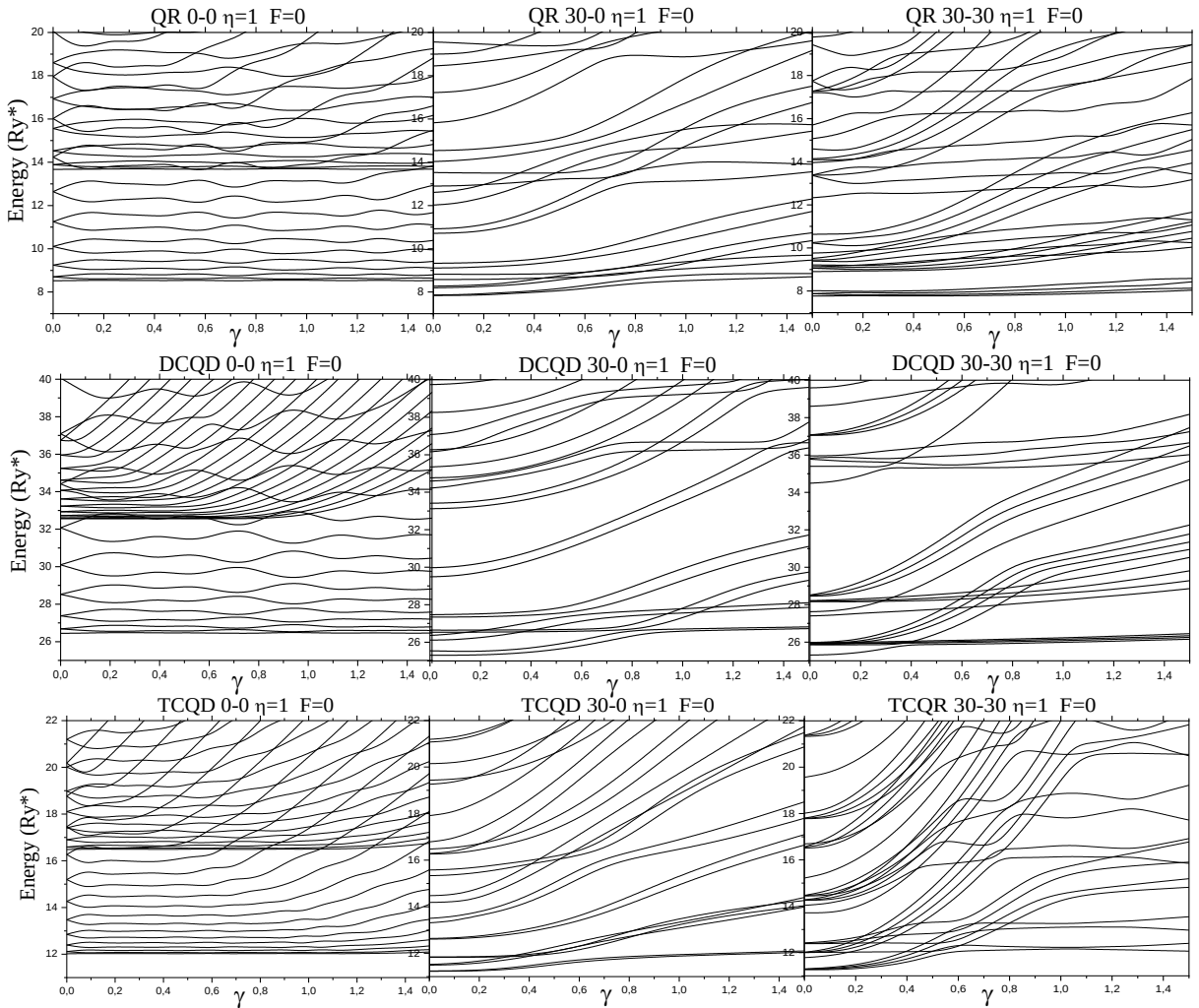
Estas diferencias reflejan las consecuencias del efecto Aharonov-Bohm (AB), que resulta de la competencia entre las fuerzas centrífugas, diamagnética y paramagnéticas, el cual se puede observar en su forma perfecta, solamente en anillos unidimensionales estrictamente circulares. En este caso, las energías de la rotación en un anillo de radio R y en un estado, con el número cuántico magnético m , en unidades adimensionales, es igual a:

$$E_m = \underbrace{m^2/R^2}_{\text{centrifugal}} + \underbrace{\gamma^2 R^2/4}_{\text{diamagnético}} \mp \underbrace{\gamma m}_{\text{paramagnético}} = (m/R \mp \gamma R/2)^2 \quad (43)$$

Se puede ver, que para campos magnéticos $\gamma = \gamma_{\min} = 2m/R^2$; $m=1,2,\dots$, las energías de un QR 1D circular oscilan y la energía del estado base en estas oscilaciones de AB se hacen periódicamente, con un periodo $\Delta\gamma_{\min} = 2/R^2$ y una energía igual a cero $E_m=0$. La existencia de los momentos angulares $L_z = \hbar m \neq 0$, en estos estados,

corresponde a la aparición de corrientes permanentes, debido al incremento del campo magnético con periodo $\Delta\gamma_{transparencia} = 2/R^2$.

Figura 19. Energías de clústeres de uno (a la izquierda), dos (en el centro) y cuatro (a la derecha) QRs (la fila superior), DCQR (la fila central) y TCQR (la fila inferior), en función de campo magnético.



Los estudios, realizados en las últimas dos décadas demostraron que un reemplazo de un QR 1D circular por una estructura con las características más parecidas a las QRs fabricadas, que tiene en cuenta la existencia del ancho del anillo finito y

diferentes tipos de defectos estructurales, producen un deterioro parcial del efecto de AB, dejando sin embargo una posibilidad en las estructuras actuales de observar tanto las oscilaciones de las curvas de las energías en función de campo magnético como los múltiples cruces de estas curvas⁴⁸.

En la primera columna de la figura 19, se presentan las curvas correspondientes para un QR un DCQR y un TCQR (todos con $\eta = 1$), cuyos perfiles de los cortes en el plano XOY se muestran en la figura 17. Las diferencias en los valores de las energías en estos tres tipos de anillos con morfologías diferentes se deben principalmente a sus dimensiones diferentes. A mayor tamaño de las nanoestructuras, mayor es el confinamiento y más alta es la energía. En el caso de un QR aislado, para los niveles más bajos en la figura 19, se ve que el periodo de oscilación es $\Delta\gamma_{\min} \approx 0.4$, que según la fórmula anterior, corresponde al radio de un QR 1D $R \approx 2.3$, se encuentra en buena concordancia con la posición del borde del perfil del QR presentado en la figura 17. El carácter general de las curvas correspondientes al DCQR y TCQR aislados es similar, con una diferencia, que las oscilaciones de la energía resultan de una superposición de oscilaciones con varios periodos, cada una corresponde a localización en uno de los anillos exteriores. En la parte superior de los gráficos de la primera columna, se ve un incremento brusco de la densidad de las curvas, el cual se debe a una superposición de dos subbandas con dos números cuánticos radiales $n=1$ y $n=2$.

En la segunda columna de la figura 19, se presentan curvas de las energías de unos clústeres de los QRs correspondientes, con las separaciones entre sus centros de simetría a lo largo de eje X, a la distancia $a_x = 20nm$. Uno puede ver que el comportamiento oscilatorio de las curvas correspondientes a la primera columna se

⁴⁸ MARIN CADAVID, Jairo Humberto. Espectro Energetico de los Sistemas De Pocas Particulas Fuertemente Confinadas en Heterojunturas Semiconductoras. *Tesis Doctoral*. Universidad Industrial de Santander, Escuela de Física. 2008.

transformó en las curvas de la segunda columna con un crecimiento monótono, acompañado con una agrupación de los niveles energéticos en unos dobletes, los cuales en algunos casos se cruzan entre sí. La desaparición de las oscilaciones está relacionada con el rompimiento de la simetría axial y su transformación en la simetría de tipo C_2 , para la cual, los estados “puros” con diferentes números cuánticos magnéticos, se enredan y el efecto diamagnético vuelve a dominar, haciendo que las energías dependan de un campo magnético monótono. Esto resulta, en la formación de unas subbandas, que consisten solamente de dos niveles, cuyas energías paulatinamente suben con el crecimiento del campo magnético.

Finalmente, en la última columna de la figura 19, se muestran las curvas similares para los clústeres de cuatro QRs, DCQRs y TCQRs. Se puede ver que los cambios en las curvas evolucionan en la misma dirección que se denotan al pasar desde la primera columna a la segunda con dos pequeñas diferencias. Primero, el número de los niveles en las subbandas se incrementó desde dos hasta cuatro, y segundo, se incrementó el número de cruces entre diferentes subbandas.

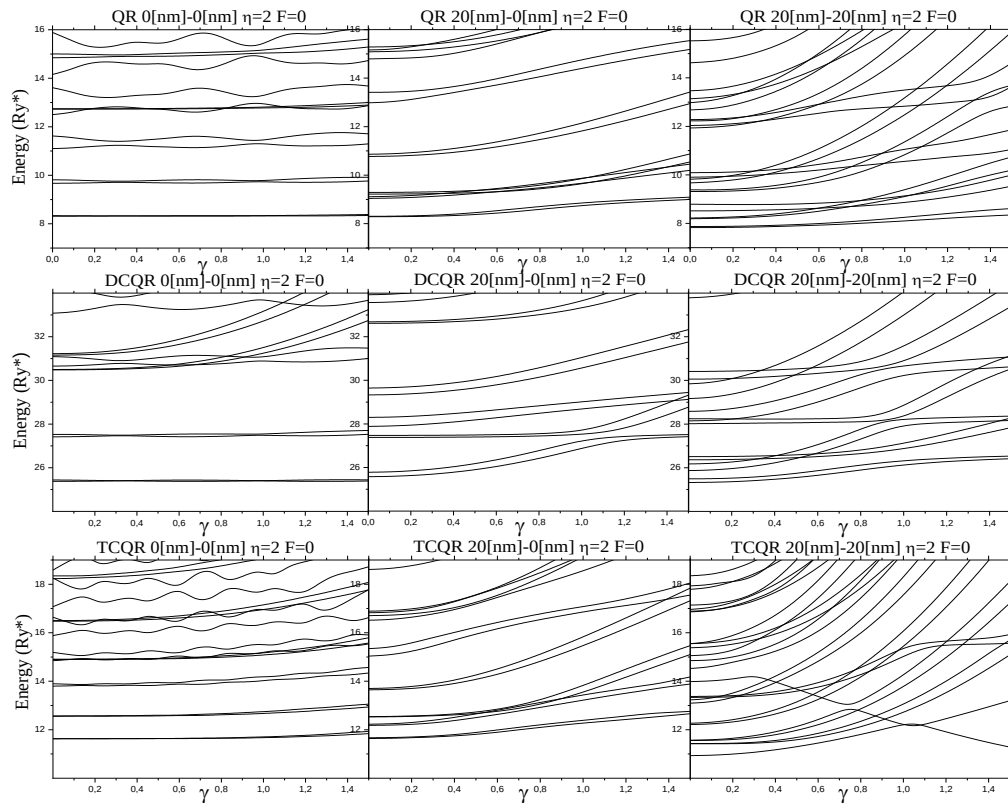
Resumiendo, del análisis de las curvas de energías presentadas en esta sección, se puede decir que el espectro energético de los QDs se modifica notablemente cuando ellos se agrupan en los clústeres. Este cambio depende significativamente, tanto del número de los QDs en el clúster como de la morfología de los QDs individuales.

5.3 EFECTO DE ANISOTROPÍA

La estructura actual de la mayoría de QDs, es anisotrópica, ya que las constantes de la red en las distintas direcciones son diferentes, y el modelo de los QDs absolutamente circulares no refleja adecuadamente la estructura real de este tipo

de nanoestructuras. Para analizar el efecto de asimetría estructural sobre el espectro energético de los QDs en este trabajo se ha considerado los QDs no-circulares, alargados en una de las direcciones cuyos perfiles se describen mediante la fórmula (4), con el parámetro de elongación $\eta \neq 1$, alargados a lo largo de eje X, cuando $\eta > 1$, y a lo largo de eje Y (en la primera columna, si $\eta < 1$). Los ejemplos de las imágenes de las estructuras asimétricas se representan en las figuras 7 y 8. En la figura 20, se presentan los resultados del cálculo para anillos cuánticos alargados con el parámetro $\eta = 2$, QR, DCQR y TCQR, tanto aislados (en la primera columna) como para los clústeres de dos y cuatro puntos en la segunda y tercera columnas, respectivamente.

Figura 20. Lo mismo que en la figura 19 pero alargados en el eje X.



Las curvas en la figura 20, para anillos alargados, deben compararse con las curvas correspondientes en la figura 19 para anillos similares pero circulares. Se puede

ver que el mayor cambio producido por la elongación o alargamiento de los anillos se presenta en las curvas de la primera columna, correspondientes a las estructuras aisladas. A pesar de que las oscilaciones de Aharonov-Bohm de los niveles energéticos también se observan en la primera columna de la figura 20, el carácter de estas oscilaciones se cambió esencialmente en comparación con las curvas para análogos circulares, presentadas en la primera columna de la figura 19. Se puede observar la primero, la formación de unas brechas notables debido a la presencia en los anillos con la asimetría estructural y segundo, la formación de las subbandas con dos niveles en cada una. Las curvas en estas subbandas se cruzan periódicamente y sus patrones son similares a unas trenzas, en los cuales dos líneas con el incremento de campo magnético inicialmente se desdoblan y después vuelven a cruzarse. Este efecto se debe a la transformación de la simetría rotacional C_{∞} de los anillos circulares a la simetría C_2 de los anillos en forma elíptica.

Por otro lado, comparando las curvas en la segunda y tercera columna de las figuras 19 y 20, se puede anotar que el cambio de las curvas, correspondientes a los clústeres de dos anillos en las segundas columnas, es poco notable. La explicación de este resultado consiste en que para este tipo de agrupación de dos anillos circulares con centros separados, ambos se encuentran sobre el mismo eje X y tienen la misma simetría C_2 tanto para anillos circulares como para elípticos. Es decir, en este caso la elongación de dos anillos a lo largo de eje X, no cambia la simetría de la estructura. Al contrario, en los clústeres de cuatro anillos cuyos gráficos se presentan en las últimas columnas de las figuras 19 y 20, la elongación de anillos a lo largo de eje X cambia la simetría de la estructura de C_4 a C_2 y los cambios de las curvas en las terceras columnas son más notables que en las segundas columnas, pero son menos significativos que los cambios para anillos aislados cuyas curvas se presentan en las primeras columnas. En resumen, entre mayor sea la variación de la simetría de una estructura producida por una asimetría

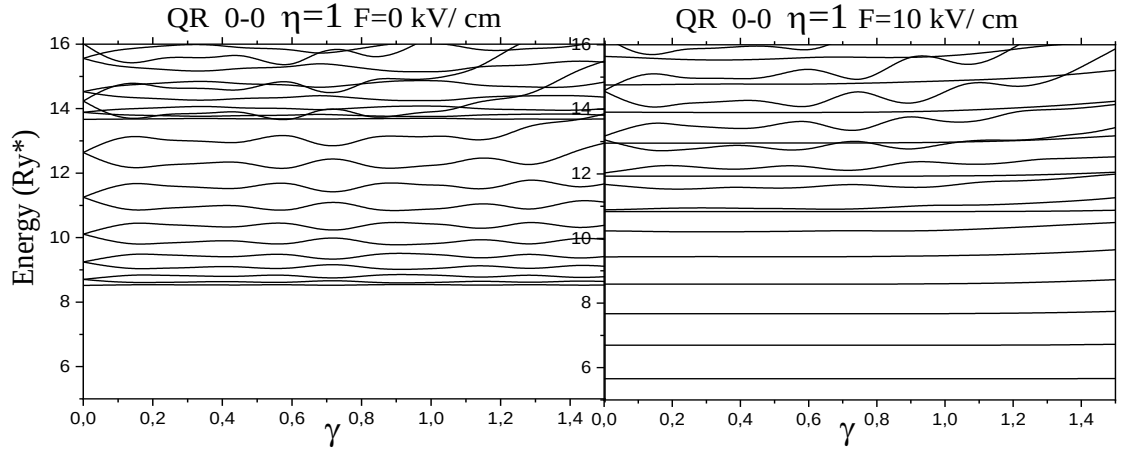
de los anillos individuales, mayor es el cambio en el espectro energético de un clúster.

5.4 EFECTO DE CAMPO ELÉCTRICO

A pesar de que en la parte numérica se ha analizado la influencia del campo eléctrico sobre los espectros energéticos de todos tipos, QDs, QRs, DCQRs y TCQRs, a continuación, presentamos los resultados para QRs. Hemos considerado el modelo de un QR aislado, y clústeres de dos y cuatro QRs en la presencia de un campo magnético B (en las unidades adimensionales γ), dirigido a lo largo de eje Z y un campo eléctrico aplicado a lo largo de eje X . En todos los casos se supone que los anillos cuánticos tienen forma circular ($\eta = 1$). En la ausencia de campo eléctrico en los anillos idealmente circulares, un campo magnético aplicado en la dirección vertical interactuando con los momentos magnéticos propios inducidos, resulta en una serie de propiedades específicas llamadas efecto de AB, como se explicó anteriormente. Se sabe, que el efecto AB es estable y puede observarse solo cuando una nanoestructura posee la simetría C_∞ . Un campo eléctrico dirigido en la dirección X introduce una perturbación cuya energía potencial $V = eFx$, rompe esta simetría y la transforma en la simetría más baja tipo C_2 . Por esa razón, uno puede esperar que la aplicación de un campo eléctrico debe producir una transformación esencial de las curvas de las energías de los anillos cuánticos en función de campo magnético.

Por otro lado, en la presencia de un campo eléctrico externo aplicado a lo largo del eje X , rompe también la homogeneidad del potencial de confinamiento, haciéndolo más bajo en uno de los extremos del QR que en el otro, a lo largo de eje X . Este cambio de potencial conduce a la localización del electrón en uno de extremos de QR, lo que hace imposible la formación de las corrientes circulares inducidos por el campo magnético.

Figura 21. Apagamiento de las oscilaciones AB en presencia de campo eléctrico



En ausencia de las corrientes circulares, las energías diamagnética y paramagnética se anulan y las oscilaciones de AB de las energías en función del campo magnético deben apagarse.

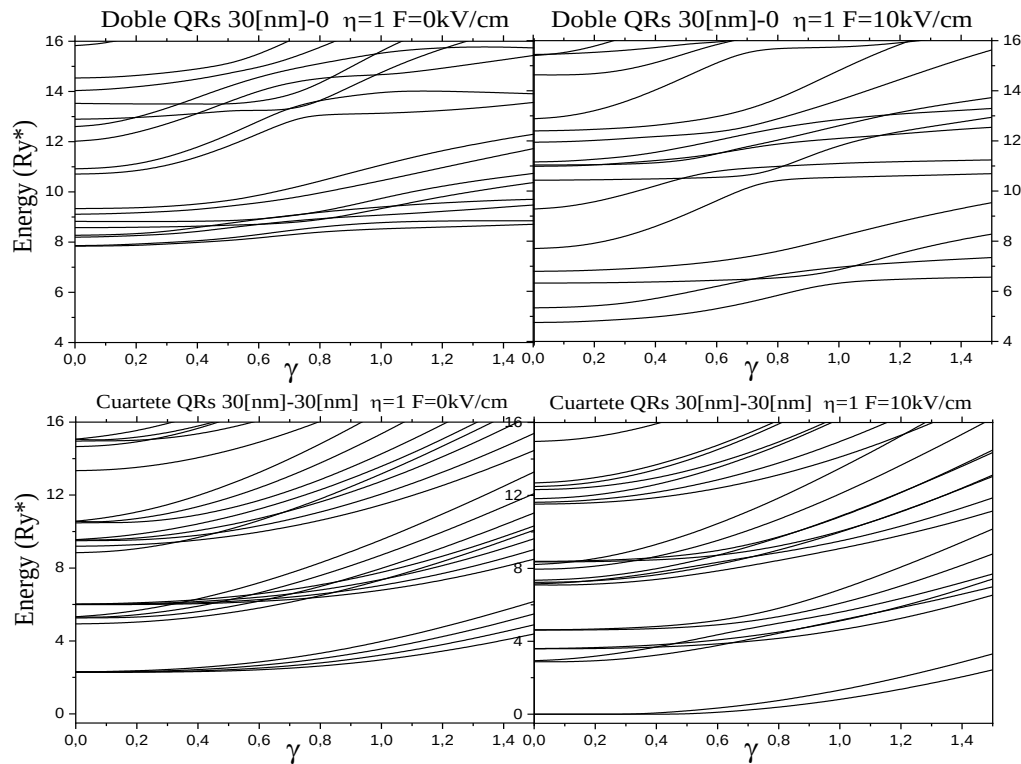
En la figura 21, en los gráficos a la derecha, se presentan los resultados obtenidos para un QR en la presencia de un campo eléctrico muy fuerte ($F=10\text{kV/cm}$) y a la izquierda para comparar las curvas correspondientes en ausencia de campo eléctrico ($F=0$).

Se ve que el campo eléctrico produce un apagamiento de las oscilaciones de AB en los 6 niveles más bajos. Estos niveles corresponden a los estados localizados cerca de uno de los extremos del QR, donde la energía es negativa, debido a contribución de campo eléctrico externo. Como en estos estados no hay ni rotación de electrones ni corriente eléctrica y por eso el campo magnético externo no afecta a las energías de estos estados. Por esta razón, las energías de estos estados no dependen de campo magnético y las 6 curvas más bajas en la figura 21 son planas. Pero las energías de otros estados son suficientemente altas para que el electrón pueda participar en un movimiento rotatorio encima de la barrera de potencial, bajo

la influencia de un campo magnético externo. En consecuencia, las curvas superiores en la figura 21, revelan la presencia de las oscilaciones de AB.

En general, en la presencia de campo eléctrico externo, la energía del estado base disminuye, como se puede ver comparando las curvas de los gráficos de la izquierda con los de la derecha. Esta tendencia también se mantiene en los gráficos similares presentados en la figura 22, para los clústeres con dos (la fila superior) y cuatro clústeres (la fila inferior) de QRs en la presencia (al lado izquierda) y en ausencia (al lado derecha) de campo eléctrico. En ambos casos las energías del electrón en todos los estados disminuyen en presencia de campo eléctrico.

Figura 22. Las energías de clústeres de dos (la fila superior) y cuatro (la fila inferior) QRs en la presencia (al lado izquierdo) y en ausencia (al lado derecho) de campo eléctrico.



Además, se puede ver un incremento significativo de las brechas entre los niveles energéticos en el clúster con dos QRs. Sin embargo, el comportamiento general del conjunto de las curvas de energías en función de campo magnético sin campo y con campo es similar por razón de que en este caso el potencial de campo eléctrico y la geometría tienen la misma simetría. Al contrario, el carácter de las dependencias para el clúster de cuatro QRs (fila inferior en figura 22) sufre un cambio notable. Si en ausencia de campo eléctrico los niveles energéticos forman unas subbandas con cuatro niveles en cada una, en la presencia de campo eléctrico estas subbandas se desdoblan y se transforman en las nuevas subbandas con solo dos niveles en cada una. Este efecto resulta del cambio de la simetría que tiene clúster en este caso de tipo C_4 al tipo de simetría C_2 que tiene el potencial de campo eléctrico

6. CONCLUSIONES

El estudio teórico de las propiedades electrónicas de unos clústeres de puntos cuánticos ha atraído en los últimos años un gran interés de los investigadores de todo el mundo. Este interés está relacionado con grandes posibilidades que ofrecen estos materiales en diferentes aplicaciones de nanotecnología contemporánea, tales como células solares, computación cuántica, optoelectrónica, etc. La descripción matemática tanto de la morfología desordenada y asimétrica de las estructuras actuales de este tipo, como el confinamiento cuántico de los portadores de carga en estos materiales dentro de las regiones muy angostas, con unas fronteras de formas complicadas, sugiere la utilización de unos métodos numéricos sofisticados, que sugieren unos cálculos voluminosos.

En este trabajo de grado se propuso un método semi analítico para describir la morfología de una película delgada formada por los clústeres de puntos cuánticos depositados sobre una capa húmeda. El método se basa en la utilización de los escaneos experimentalmente digitalizados de los perfiles de cortes de puntos cuánticos reales, para formar las expresiones analíticas de las funciones $h = h(x, y)$ que definen la variación del grosor en las películas delgadas, utilizando las transformaciones de rotación, compresión y reflexión. Para describir el movimiento del portador de carga confinado dentro esta película, se utilizó las aproximaciones de masa efectiva y adiabática, que permitieron reducir el problema actual a una ecuación de Schrödinger para una partícula en un potencial adiabático bidimensional.

En este trabajo de grado se elaboraron los métodos, algoritmos y programas nuevos para calcular el potencial adiabático y resolver la ecuación de Schrödinger bidimensional y fueron aplicados para analizar los espectros de los clústeres con dos y cuatro puntos cuánticos con diferentes perfiles: en forma de una lente, un

anillo, un anillo con doble borde y un anillo con triple borde. Para cada una de estas estructuras, los perfiles de sus cortes fueron tomados de las publicaciones recientes sobre las estructuras fabricadas y escaneadas. Los resultados de los cálculos obtenidos permitieron analizar cómo dependen los espectros energéticos, de los clústeres formados por estas estructuras, de la morfología, del tamaño, de la asimetría de los puntos cuánticos, de la separación entre ellos, del número de puntos cuánticos en un clúster y además de los campos magnético y eléctrico externos. El análisis de las dependencias encontradas muestra una alta sensibilidad del espectro energético de los clústeres de todos estos factores

BIBLIOGRAFÍA

ABBARCHI, M.; CAVIGLI, L.; SOMASCHINI, C.; BIETTI, S.; GURIOLI, M.; VINATTIERI, A.; and SANGUINETTI, S. Micro-photoluminescence of GaAs/AlGaAs triple concentric quantum rings. *Nanoscale research letters*, 2011, vol. 6, no 1, p. 569.

AMAHA, S.; HATANO, T.; KUBO, T.; TOKURA, Y.; AUSTING, D. G.; and TARUCHA, S. Stability diagrams of laterally coupled triple vertical quantum dots in triangular arrangement. *Applied Physics Letters*, 2009, vol. 94, no 9, p. 092103.

BIMBERG, D.; KIRSTAEDTER, N.; LEDENTSOV, N.; ALFEROV, Z.; KOPEV, P. S.; USTINOV, V. M. InAs–GaAs quantum pyramid lasers: in situ growth, radiative lifetimes and polarization properties. *Japanese journal of applied physics*, 1996, vol. 35, no 2S, p. 1311.

BOONPENG, P.; JEVASUWAN, W.; SURAPRAPAPICH, S.; RATANATHAMMAPHAN, S., and PANYAKEOW, S. Quadra-quantum dots grown on quantum rings having square-shaped holes: Basic nanostructure for quantum dot cellular automata application. *Microelectronic Engineering*, 2009, vol. 86, no 4-6, p. 853-856.

BOWLER, D. R. Atomic-scale nanowires: Physical and electronic structure. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2004, vol. 16, no 24, p. R721.

BRACKER, A. S.; STINAFF, E. A.; GAMMON, D.; WARE, M. E.; TISCHLER, J. G.; PARK, D... and RIVA, C. Binding energies of positive and negative trions: From quantum wells to quantum dots. *Physical Review B*, 2005, vol. 72, no 3, p. 035332.

CHAKRABORTY, Tapash and PIETILÄINEN, Pekka. Electron-electron interaction and the persistent current in a quantum ring. *Physical Review B*, 1994, vol. 50, no 12, p. 8460.

CORREDOR, Carlos Teofilo; GUTIÉRREZ, Willian. Molecular states of laterally coupled quantum dots under electric fields. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, 2014, no 71, p. 17-24.

DAVIES, John H. *The physics of low-dimensional semiconductors: an introduction*. Cambridge university press, 1998.

DUQUE, Carlos Alberto; MORALES, Álvaro; y MORA-RAMOS, Miguel. Propiedades ópticas de impurezas donadoras en anillos cuánticos sometidos a los efectos combinados de campo eléctrico y radiación láser intensa no resonante. *Revista de la Academia Colombiana de Ciencias Exactas, Físicas y Naturales*, 2015, vol. 39, p. 67-76.

ESAKI, I. and TSU, R. I. B. M. Int. Business Machines (IBM) J. Res. Develop, 1970, vol. 14, p. 61.

FRY, P. W.; ITSKEVICH, I. E.; MOWBRAY, D. J.; SKOLNICK, M. S.; FINLEY, J. J.; BARKER, J. A... and HOPKINSON, M. Inverted electron-hole alignment in InAs-GaAs self-assembled quantum dots. *Physical review letters*, 2000, vol. 84, no 4, p. 733.

GAMMON, Daniel. Electrons in artificial atoms. *Nature*, 2000, vol. 405, no 6789, p. 899-900.

GARCIA, L. F.; MARIN, J. H.; MIKHAILOV, I. D. Semi-empiric theory of electron-hole pair confined in thin GaAs/Ga (Al) As layer. *Physica B: Condensed Matter*, 2017, vol. 521, p. 84-92.

GARCIA, L. F.; MIKHAILOV, I. D., and PAREDES, H. 4th International Meeting for Researchers in Materials and Plasma Technology (4th IMRMPT). Volume 935, 23–26 May 2017, Santa Marta, Colombia.

GARCÍA, L. F.; REVINOVA, S. Yu; MIKHAILOV, I. D. Band nonparabolicity effect on spectral properties of quantum ring. *Superlattices and Microstructures*, 2017, vol. 103, p. 151-160.

GRUNDMANN, Marius; STIER, Oliver; BIMBERG, Dieter. InAs/GaAs pyramidal quantum dots: Strain distribution, optical phonons, and electronic structure. *Physical Review B*, 1995, vol. 52, no 16, p. 11969.

GUTIÉRREZ, Willian; MARIN, Jairo H.; and MIKHAILOV, Ilia D. Charge transfer magnetoexciton formation at vertically coupled quantum dots. *Nanoscale research letters*, 2012, vol. 7, no 1, p. 585.

HARRISON, Paul. Quantum wells, wires and dots. John Wiley & Sons, 2001.

HORNISCHER, W.; GRAMBOW, P.; DEMEL, T.; BAUSER, E.; HEITMANN, D.; VON KLITZING, K.; and PLOOG, K. Quantum wires prepared by liquid-phase-epitaxial overgrowth of dry-etched AlGaAs-GaAs heterostructures. *Applied physics letters*, 1992, vol. 60, no 24, p. 2998-3000.

JACAK, Lucjan; HAWRYLAK, Pawel; WOJS, Arkadiusz. Quantum dots. Springer Science & Business Media, 2013.

KIM, J. S.; SONG, J. D.; BYEON, C. C.; KANG, H.; JEONG, M. S.; CHO, N. K.;... LEE, J. Fabrication of coupled GaAs quantum dots and their optical properties. *Physica Status Solidi C*, 2009, vol. 6, no 4, p. 802-805.

KLEEMANS, N. A.; BOMINAAR-SILKENS, I. M.; FOMIN, V. M.; GLADILIN, V. N.; GRANADOS, D.; TABOADA, A. G... and MAAN, J. C. Oscillatory persistent currents in self-assembled quantum rings. *Physical review letters*, 2007, vol. 99, no 14, p. 146808.

LEONARD, D.; POND, K.; and PETROFF, P. M. Critical layer thickness for self-assembled InAs islands on GaAs. *Physical Review B*, 1994, vol. 50, no 16, p. 11687.

LING, Hong-Shi and LEE, Chien-Ping. Evolution of self-assembled InAs quantum ring formation. *Journal of Applied Physics*, 2007, vol. 102, no 2, p. 024314.

LÓPEZ-LÓPEZ, M.; and MÉNDEZ-GARCÍA, V. H. Autoensamblado de puntos cuánticos semiconductores. *Cinvestav*, 2008, p. 44-49.

MANO, T.; KURODA, T.; SANGUINETTI, S.; OCHIAI, T.; TATENO, T.; KIM, J... and KOGUCHI, N. Self-assembly of concentric quantum double rings. *Nano letters*, 2005, vol. 5, no 3, p. 425-428.

MARIN CADAVID, Jairo Humberto. *Espectro Energetico De Los Sistemas De Pocas Particulas Fuertemente Confinadas En Heterojunturas Semiconductoras*. Tesis Doctoral. Universidad Industrial de Santander, Escuela de Física. 2008.

MIKHAILOV, I. D.; GARCÍA, L. F.; and MARÍN, J. H. Vertically coupled quantum dots charged by exciton. *Microelectronics journal*, 2008, vol. 39, no 3-4, p. 378-382.

PANYAKEOW, Somsak. Quadra-Quantum Dots and Related Patterns of Quantum Dot Molecules: Basic Nanostructures for Quantum Dot Cellular Automata Application. *Cellular Automata T Innovative Modelling for Science and Engineering*, 2011, p. 95.

PILLONNET, A.; PEREIRA, A.; MARTY, O., and CHAMPEAUX, C. Valence state of europium doping ions during pulsed-laser deposition. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2011, vol. 44, no 37, p. 375402.

RAITH, Martin; STANO, Peter; and FABIAN, Jaroslav. Theory of single electron spin relaxation in Si/SiGe lateral coupled quantum dots. *Physical Review B*, 2011, vol. 83, no 19, p. 195318.

SANGUINETTI, Stefano; KOGUCHI, Noboyuki; MANO, Takaaki; KURODA, Takashi. Droplet Epitaxy Quantum Ring Structures. *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*, Volume 6, Number 1, March 2011, pp. 34-50(17).

SEIFERT, W.; CARLSSON, N.; MILLER, M.; Pistol, M. E.; and SAMUELSON, L. In-situ growth of quantum dot structures by the Stranski-Krastanow growth mode. *Progress in Crystal Growth and Characterization of Materials*, 1996, vol. 33, no 4, p. 423-471.

STANGL, Julian; HOLÝ, Vàclav; BAUER, Guenther. Structural properties of self-organized semiconductor nanostructures. *Reviews of modern physics*, 2004, vol. 76, no 3, p. 725.

SUGIMOTO, Y.; IKEDA, N.; CARLSSON, N.; ASAKAWA, K.; KAWAI, N. & INOUE, K Light-propagation characteristics of Y-branch defect waveguides in AlGaAs-based air-bridge-type two-dimensional photonic crystal slabs. 2002. Vol. 27, Issue 6, pp. 388-390.

WENSAUER, Andreas; STEFFENS, Oliver; SUHRKE, Michael and RÖSSLER, Ulrich. Laterally coupled few-electron quantum dots. *Physical Review B*, 2000, vol. 62, no 4, p. 2605.

WILLEMS, D. J.; VAN DER MERWE, J.H.; WOODWARD, M. P.; ROWLAND, M. P.; POWERS, M. H.; JULIARD, P. A... and FORDHAM, D. S. *Discussions of the Faraday Society*, 1949, vol. 5, p. 283-291.

WU J.; WANG, Z.; LI, A. Z.; ZENG, Z.; LI. S. Formation of GaAs double rings through gallium migration and nanodrilling. *Journal of nanoelectronics and optoelectronics*, 2011, vol. 6, no 1, p. 58-61.

WU, Yiyi; FAN, Rong; and YANG, Peidong. Block-by-block growth of single-crystalline Si/SiGe superlattice nanowires. *Nano Letters*, 2002, vol. 2, no 2, p. 83-86.

ZOU, J.; LIAO, X. Z.; COCKAYNE, D. J. H.; and LEON, R. Transmission electron microscopy study of $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}$ as quantum dots on a GaAs (001) substrate. *Physical Review B*, 1999, vol. 59, no 19, p. 12279.