

Impacto del Desorden Estructural en las Propiedades Electrónicas de Clústeres Hexagonales de
Puntos Cuánticos

Claudia Vanessa Rangel Acosta

Trabajo de Grado para Optar al Título de Físico

Director

Willian Gutiérrez Niño

Doctor en Ciencias Naturales - Física

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ciencias

Escuela de Física

Física

Bucaramanga

2026

Dedicatoria

A mis queridos padres y hermano, a mi director de trabajo de grado y a aquellas personas que confiaron en mí y me animaron a seguir. Es a ellos a quienes dedico este trabajo de grado, porque sin ellos nada de esto hubiese sido posible.

Agradecimientos

Porque como seres humanos no crecemos ni aprendemos solos, porque somos gracias a quienes nos rodean. Por ello, quiero expresar aquí mis más sinceros agradecimientos:

A Dios, por guiarme en este arduo camino, por levantarme cuando no me sentía capaz de seguir y porque gracias a él logro disfrutar de las bellezas que habitan en este mundo.

A mi director, el profesor Willian Gutiérrez, por su confianza puesta en mí al aceptarme como su estudiante, por guiarme en todo este proceso de manera atenta y sobretodo paciente, por las charlas motivadoras, por las risas incontables con él y mis demás compañeros que hacían más amena cada clase y por ser ese profesor que cada estudiante quisiera conocer.

A mis compañeros de carrera, por acompañarme en este proceso, por ayudarme en diversas cosas, por todas las enseñanzas, por las largas horas de estudio, por su confianza y apoyo.

A mi madre, por hacer de este camino un camino más llevadero, por aligerar mi carga día a día y por creer en mí incluso cuando ni yo lo hacía. Gracias por ser mi motivación de vida.

A mi padre, por enseñarme a disfrutar de cada momento, en especial de los más pequeños.

A mi hermano, quien desde mi infancia me cuidó y me abrió la puerta a experiencias que marcaron mi manera de ver y disfrutar la vida.

A mi perrito y amigo fiel, Maley, por toda la felicidad que me brinda día a día y por siempre recibirme en casa con toda la felicidad del mundo después de un largo día en la universidad.

A mis amigos más cercanos, por escucharme y aconsejarme en los momentos más difíciles, porque con simples acciones logran gran motivación en mí. En especial, gracias a una persona con quien tuve la dicha de iniciar este proceso universitario y, pese a que probablemente nunca llegue a leer esto, me motivó silenciosamente de inicio a fin.

A ellos, gracias y mil gracias, porque este logro no hubiese sido posible sin ese granito de arena que cada uno aportó.

Índice

Introducción	9
1 Marco Teórico	11
1.1 Puntos Cuánticos	11
1.2 Crecimiento de Puntos Cuánticos Autoensamblados	12
1.3 Modelo Teórico del Electrón en un Cristal	15
1.4 Estado del Arte	16
2 Modelo Teórico	19
3 Método de Solución	22
4 Análisis de Resultados	25
4.1 Efecto del Acoplamiento y la No Uniformidad	25
4.2 Efecto de Campo Eléctrico	41
4.3 Efecto de Campo Magnético	47
5 Conclusiones	52
Referencias Bibliográficas	54

Índice de Figuras

Figura 1.	Modo de crecimiento Stranski–Krastanov (SK)	13
Figura 2.	Imagen de microscopía de fuerza atómica (Atomic Force Microscope, AFM) de nanoestructuras de InP obtenidas mediante DE para diferentes espesores de indio.	15
Figura 3.	Esquema de la vista superior de un clúster hexagonal de seis QDs de InAs en una matriz de GaAs	20
Figura 4.	Mallado bidimensional con elementos triangulares correspondiente al nivel de refinamiento “más fina” utilizado en la simulación.	24
Figura 5.	Configuraciones representativas del clúster para distintos regímenes de acoplamiento	26
Figura 6.	Densidad de probabilidad electrónica para diferentes casos de desorden estructural	27
Figura 7.	Espectro de bajas energías en función del parámetro de acoplamiento en el clúster hexagonal uniforme	29
Figura 8.	Acercamiento a la región de cruce de niveles de energía	32
Figura 9.	Densidades de probabilidad electrónica para un electrón en un clúster hexagonal uniforme para distintos valores de γ	33
Figura 10.	Espectro de bajas energías en función del parámetro de acoplamiento en el clúster hexagonal para el caso de vacancia	34
Figura 11.	Densidades de probabilidad electrónica para un electrón en el clúster hexagonal con vacancia para distintos valores de γ	36
Figura 12.	Espectro de bajas energías en función del parámetro de acoplamiento en el clúster hexagonal para el caso de impureza ($\rho = 1.5$)	37

Figura 13. Espectro de bajas energías en función de ρ en el clúster hexagonal bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo, con sus respectivas densidades de probabilidad	39
Figura 14. Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo eléctrico externo en el clúster hexagonal uniforme bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo	42
Figura 15. Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo eléctrico externo en el clúster hexagonal para el caso de vacancia bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo	43
Figura 16. Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo eléctrico externo en el clúster hexagonal para el caso de impureza bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo	44
Figura 17. Momento dipolar inducido en función del campo eléctrico	46
Figura 18. Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo magnético externo en el clúster hexagonal uniforme bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo	47
Figura 19. Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo magnético externo en el clúster hexagonal para el caso de vacancia bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo	49
Figura 20. Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo magnético externo en el clúster hexagonal para el caso de impureza bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo	50
Figura 21. Momento dipolar magnético en función de la intensidad del campo magnético	51

Resumen

Título: Impacto de la presencia de desorden estructural en las propiedades electrónicas de clústeres hexagonales de puntos cuánticos*

Autores: Claudia Vanessa Rangel Acosta**

Palabras Clave: Clústeres de puntos cuánticos, Desorden estructural, Propiedades electrónicas, Acoplamiento, Efecto Stark no lineal.

Descripción:

Durante el proceso de crecimiento, los clústeres de puntos cuánticos pueden presentar no uniformidad en relación con el tamaño de los puntos individuales, atribuible a fluctuaciones en las condiciones de deposición o de los mecanismos de autoorganización. Con el objetivo de analizar el impacto de este tipo de desorden estructural en las propiedades electrónicas de clústeres de puntos cuánticos, se llevó a cabo un estudio teórico que considera un electrón de conducción en un clúster cíclico formado por seis puntos cuánticos de forma circular. El desorden estructural se modeló introduciendo variaciones en el tamaño de los puntos constituyentes. La ecuación de onda electrónica se planteó en el marco de la aproximación de masa efectiva y se resolvió mediante el método de elementos finitos. Se estudió la influencia del grado de inhomogeneidad sobre las energías y las distribuciones de probabilidad de los estados más bajos, en presencia de un campo magnético perpendicular y un campo eléctrico en el plano. Adicionalmente, se determinaron los efectos que pueda tener la variación de parámetros estructurales sobre el momento dipolar magnético y el momento dipolar inducido por el campo eléctrico. Los resultados evidencian que la no uniformidad en el tamaño de los puntos que conforman clústeres dispuestos en cadenas cerradas puede inducir una fuerte localización de los estados electrónicos, lo que a su vez vuelve altamente sensibles sus propiedades espectrales.

* Trabajo de Grado

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Willian Gutiérrez Niño. Doctor en Ciencias Naturales - Física

Abstract

Title: Impact of the presence of structural disorder on the electronic properties of hexagonal quantum dot clusters*

Authors: Claudia Vanessa Rangel Acosta**

Key Words: Quantum dot cluster, Structural disorder, Electronic properties, Coupling, Non-linear Stark effect.

Description:

During the growth process, quantum dot clusters may exhibit size non-uniformity among individual quantum dots, attributable of fluctuations in deposition conditions or self-assembly mechanisms. To analyze the impact of this type structural disorder on the electronic properties of quantum dot clusters, a theoretical study was conducted considering a conduction electron in a cyclic cluster composed of six circular quantum dots. The structural disorder has been modeled by introducing variations in the size of the constituent quantum dots. The electron wave equation was formulated within the framework of the effective mass approximation and solved using the finite element method. The influence of the degree of inhomogeneity on the energies and probability distributions of the lowest-energy states was studied in the presence of a perpendicular magnetic field and an in-plane electric field. Additionally, the effects of variations in structural parameters on the magnetic dipole moment and the dipole moment induced by the electric field were determined. The results show that non-uniformity in the size of the quantum dots forming clusters arranged in closed chains can induce strong localization of the electronic states, which in turn makes their spectral properties highly sensitive.

* Bachelor Thesis

** Facultad de Ciencias. Escuela de Física. Director: Willian Gutiérrez Niño. Doctor en Ciencias Naturales - Física

Introducción

Desde sus orígenes, el ser humano se ha caracterizado por su audacia: por no conformarse con lo conocido y desafiar los límites de lo posible. En su búsqueda por comprender y transformar la naturaleza, ha aprendido a mirar cada vez más de cerca, descubriendo que lo diminuto puede encerrar un universo entero de fenómenos.

En las últimas décadas, esta audacia ha dado lugar a uno de los mayores logros científicos y tecnológicos de nuestro tiempo: la nanotecnología (Binns, 2010). La posibilidad de manipular la materia a escalas nanométricas ha despertado un gran interés en el diseño de materiales con propiedades electrónicas inimaginables, donde estas no solo dependen de su composición, sino también de su estructura, tamaño y forma.

Entre los sistemas más representativos de esta revolución se encuentran los puntos cuánticos (Quantum Dots, QDs) (Cao, 2004), nanoestructuras semiconductoras capaces de confinar electrones en las tres dimensiones espaciales, otorgándoles niveles de energía discretos similares a los de un átomo y, por esta razón, se les conoce como “átomos artificiales”. Esta propiedad ha impulsado su aplicación en dispositivos optoelectrónicos (Adhikary & Chakrabarti, 2018), láseres de estado sólido (Ledentsov et al., 2000), celdas solares y tecnologías emergentes como la computación cuántica (Chutia et al., 2006).

Sin embargo, los puntos cuánticos no solo son interesantes de manera individual. Cuando varios de ellos se acoplan entre sí, forman estructuras denominadas clústeres de puntos cuánticos (Quantum Dot Clusters, QDCs) o moléculas de puntos cuánticos (Quantum Dot Molecules, QDMs). Este acoplamiento genera nuevas propiedades electrónicas y ópticas imposibles de observar en puntos individuales, ampliando su potencial para el desarrollo de tecnologías como

computadoras cuánticas, pantallas QLED y celdas solares más eficientes. No obstante, las propiedades de estos sistemas dependen de manera crítica de su geometría, del grado de acoplamiento entre los puntos y, especialmente, de la presencia o ausencia de desorden estructural (Gutiérrez Niño et al., 2025).

En la práctica, la fabricación de QDCs perfectamente ordenados resulta casi imposible, puesto que pequeñas variaciones en el tamaño, la posición o la morfología de los puntos individuales pueden alterar de forma significativa el espectro de energías y la distribución espacial de los estados electrónicos (Cuadra & Nieto-Borge, 2021). Lejos de ser meramente una imperfección, el desorden estructural puede inducir fenómenos como la localización electrónica, la modificación de los niveles energéticos o incluso el control de las propiedades cuánticas del sistema. Este comportamiento ha despertado un creciente interés teórico al evidenciar que el desorden, tradicionalmente visto como un obstáculo, puede convertirse en un recurso útil para ajustar las propiedades electrónicas y ópticas de materiales nanoestructurados (Fang et al., 2020). Dentro de este marco, surge el interés por analizar cómo las irregularidades estructurales afectan la distribución de los estados electrónicos, la sensibilidad espectral del sistema y su respuesta ante campos eléctricos y magnéticos externos en clústeres de geometrías específicas.

En este sentido, el presente trabajo propone un estudio teórico sobre el impacto del desorden estructural en las propiedades electrónicas de clústeres hexagonales de puntos cuánticos. Para ello, se consideran variaciones en el tamaño de los QDs y en su grado de acoplamiento, y se analiza su influencia sobre parámetros físicos como la energía de los estados más bajos, la magnetización y el momento dipolar inducido. Comprender estos efectos permitirá avanzar en el diseño de materiales nanoestructurados más robustos y controlables, en los que la presencia de desorden, tradicionalmente vista como una limitación, pueda aprovecharse como una herramienta de ajuste y optimización a nivel cuántico.

Marco Teórico

1.1 Puntos Cuánticos

Aquellos materiales en los cuales los parámetros que definen sus propiedades físicas se pueden ajustar con gran exactitud en regiones de solo algunos nanómetros son conocidos como nanoestructuras semiconductoras y hacen parte actualmente de los llamados Sistemas de Baja Dimensionalidad (Geller, 2001). Estos sistemas se clasifican en tres grandes grupos según su dimensionalidad: nanoestructuras quasi-bidimensionales, como es el caso de los pozos cuánticos, que son aquellas donde se confina una sola dimensión; nanoestructuras quasi-unidimensionales, como es el caso de los hilos cuánticos, donde se confinan dos dimensiones; y nanoestructuras quasi-cerodimensionales, como es el caso de los puntos cuánticos, donde se tiene confinamiento cuántico en las tres dimensiones espaciales (Cuadra & Nieto-Borge, 2021).

Entre todas estas, los puntos cuánticos (Quantum Dots, QDs) ganan la mayor atención debido a su mayor confinamiento cuántico y a sus tan peculiares características y aplicaciones. Este confinamiento da lugar a propiedades inesperadas en materiales de tamaños macroscópicos. Cabe recordar que, al ser las dimensiones características del material del nanocrystal del mismo orden de la longitud de onda de De Broglie de los portadores de carga, se da lugar a los efectos cuánticos (Harrison & Valavanis, 2016).

Otro punto a destacar de los QDs es su espectro de energías discreto, análogo al de los átomos, haciéndolos recibir el nombre de “átomos artificiales” (Gutiérrez Niño et al., 2025). Sin embargo, estos presentan grandes diferencias con respecto a los átomos naturales, como lo son su variedad de geometrías, tamaños y disposiciones espaciales, lo que permite diversas

aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos reduciendo su escala de integración y mejorando su desempeño (Corredor, 2014).

Así como los átomos pueden unirse para formar moléculas con propiedades distintas a las de sus componentes individuales, estas nanoestructuras también pueden acoplarse entre sí para originar sistemas colectivos con comportamiento cuántico complejo. A dichas agrupaciones se les conoce como clústeres de puntos cuánticos (Quantum Dot Clusters, QDCs) o moléculas de puntos cuánticos (Quantum Dot Molecules, QDMs). Este acoplamiento da lugar a nuevas propiedades electrónicas y ópticas, imposibles de observar en QDs aislados.

Los QDCs se proyectan como piezas clave para el desarrollo de computadoras cuánticas, pantallas QLED, y celdas solares más eficientes (Ledentsov et al., 2000). Gracias a la posibilidad de manipular diversos parámetros de estos QDCs –como lo es su confinamiento cuántico, sus parámetros geométricos y estereoquímicos de las heteroestructuras–, sus propiedades optoelectrónicas son más flexibles en comparación con moléculas naturales, cuyas propiedades solo son modificables por medio del potencial de Coulomb.

1.2 Crecimiento de Puntos Cuánticos Autoensamblados

Los QDs pueden ser sintetizados mediante técnicas como: la litografía, la epitaxia de haces moleculares (Molecular Beam Epitaxy, MBE) y métodos coloidales. A pesar de sus diferencias experimentales, todas estas técnicas comparten el mismo principio fundamental: el QD se encuentra rodeado por una matriz cuya brecha de energía prohibida (bandgap) es mayor. Esta diferencia en las brechas de energía genera un potencial de confinamiento que limita el movimiento de los portadores de carga dentro del punto, dando origen al confinamiento cuántico (Ginés, 2022).

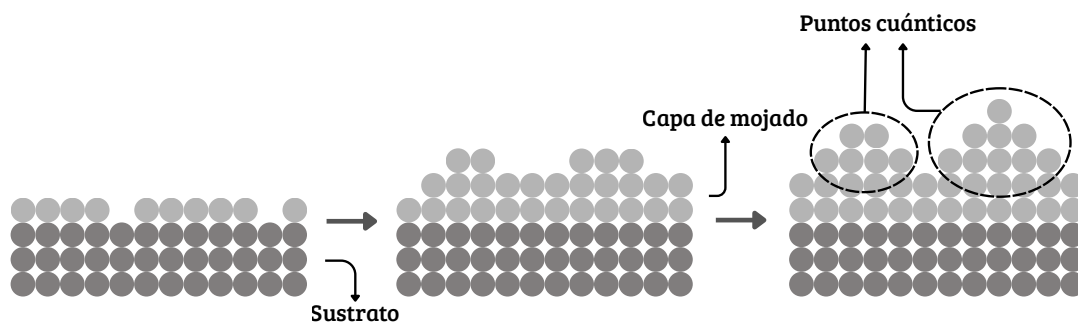
Este trabajo se enfoca en puntos cuánticos autoensamblados (Self-Assembled Quantum

Dots, SAQDs), los cuales se obtienen principalmente mediante técnicas como la epitaxia de haces moleculares (Molecular Beam Epitaxy, MBE) o la epitaxia por haces químicos de vapor.

En el caso del método MBE, se distinguen tres modos de crecimiento: Frank-Van der Merwe (FvdM), denominado también crecimiento capa a capa, en el cual el depósito es bidimensional y funciona nucleando una capa sobre la anterior, formando una superficie plana; Volmer-Weber (VW), que, a diferencia del anterior, se caracteriza por la formación directa de islas tridimensionales; y Stranski-Krastanov (SK), el cual se encuentra en un punto intermedio entre los dos anteriores (Ginés, 2022). Este último consiste en la creación de QDs de forma espontánea durante el crecimiento de materiales con desajuste de red, debido a la acumulación de tensión elástica en las primeras capas depositadas. Cuando esta tensión supera un valor crítico, el sistema minimiza su energía; como consecuencia, la superficie se relaja generando islas tridimensionales, dando lugar a los QDs (véase la Figura 1).

Figura 1

Modo de crecimiento Stranski–Krastanov (SK)



Nota. En este modo, tras una capa de mojado depositada sobre el sustrato, se generan relieves en forma de islas que pueden evolucionar a SAQDs en presencia de tensión de red.

Este método se ha utilizado principalmente para la formación de SAQDs en semiconductores III-V y II-VI. Por ejemplo, el sistema InAs/GaAs presenta un desajuste de aproximadamente 7%, lo que favorece el crecimiento tipo SK (Valizadeh et al., 2012).

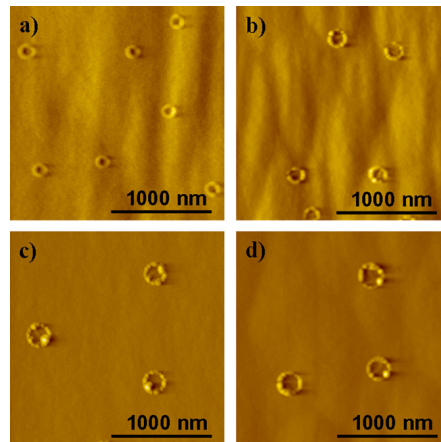
Como alternativa al modo de crecimiento SK, otra técnica relevante es la epitaxia por goteo (Droplet Epitaxy, DE), la cual consta de dos etapas principales: la formación de nanogotas de un elemento del grupo III sobre el sustrato y la posterior exposición de estas al haz de elementos del grupo V (Jevasuwan et al., 2007). Además, permite la auto-formación de QDs sin necesidad de un desajuste de red tan marcado como en el modo SK.

El proceso consiste típicamente en depositar gotas líquidas de un metal del grupo III (por ejemplo, Ga o In) sobre el sustrato bajo condiciones de vacío, para posteriormente suministrar un flujo de un elemento del grupo V (como As o P), el cual induce la cristalización de las gotas y da lugar a nanocristales semiconductores. Estudios detallados han mostrado que la técnica DE brinda un mayor control en cuanto al tamaño, la densidad y la morfología de los QDs, e incluso evita la formación de capa húmeda en algunos casos (Jevasuwan et al., 2007).

Cabe mencionar que este método no se limita únicamente a la formación de puntos cuánticos. También se ha demostrado la obtención de anillos cuánticos y otras nanoestructuras complejas con alta calidad cristalina en sistemas como GaAs, GaN, InGaAs e InAs (Jevasuwan et al., 2007) (véase la Figura 2).

Figura 2

Imagen de microscopía de fuerza atómica (Atomic Force Microscope, AFM) de nanoestructuras de InP obtenidas mediante DE para diferentes espesores de indio.



Nota. Tomado de Jevasuwan et al. (2007).

1.3 Modelo Teórico del Electrón en un Cristal

En un cristal semiconductor se tiene un inmenso conjunto de núcleos atómicos con sus electrones correspondientes. La determinación de los estados estacionarios y del espectro energético de dicho sistema resulta, en general, casi imposible, dado que el número de variables independientes es del orden del número total de partículas. Por ello, es necesario realizar una serie de aproximaciones que ayuden a reducir considerablemente el número de variables independientes y, así, poder obtener resultados razonables.

Debido a que el protón es más masivo que el electrón, la velocidad de los electrones supera considerablemente la de los protones (en aproximadamente dos órdenes de magnitud). Esto da lugar a considerar, en primera aproximación: el movimiento de los electrones en un campo de potencial de núcleos fijos (Corredor, 2014). Dicha consideración es llamada aproximación adiabá-

tica o de Born-Oppenheimer.

Con el fin de reducir aún más las variables existentes, se entra a considerar el núcleo y los electrones internos que lo apantallan –los cuales están fuertemente ligados al núcleo– como una única partícula de carga neta igual a la carga del núcleo menos la carga de estos electrones. Esta consideración es conocida como la aproximación de valencia, pues se toman en cuenta ahora únicamente los electrones de valencia.

Pese a las simplificaciones anteriores, el número de variables independientes sigue siendo extraordinariamente grande ya que se tienen aproximadamente 10^{23} electrones por cm^3 . Por esta razón se introduce una hipótesis adicional: cada electrón de valencia percibe aproximadamente un mismo potencial promedio generado por los demás electrones de valencia, el cual se supone periódico debido a las simetrías de la red cristalina (Ashcroft & Mermin, 1976). Esta última consideración reduce el problema inicial al análisis de un único electrón, y es llamada como aproximación de campo medio (Corredor, 2014).

De esta forma, el complejo problema de muchos cuerpos se reduce a estudiar el movimiento de un solo electrón bajo un potencial periódico, lo cual constituye la base de la teoría de bandas electrónicas en los sólidos. Este enfoque permite comprender el origen de los niveles permitidos y prohibidos en los materiales semiconductores.

1.4 Estado del Arte

Los clústeres de puntos cuánticos han adquirido gran relevancia en las últimas décadas debido a la aparición de propiedades electrónicas que no pueden reproducirse ni en puntos individuales ni en sistemas atómicos convencionales. Este interés ha motivado estudio tanto experimentales orientados en su fabricación como teóricos enfocados en comprender la influencia de la

geometría y del acoplamiento entre los puntos.

Dentro de los estudios experimentales sobre moléculas de puntos cuánticos, el trabajo de Lee et al. (2006) reporta la fabricación de QDMs autoensambladas de InGaAs mediante droplet homoepitaxy, mostrando que la morfología y el número de puntos que conforman la molécula dependen críticamente de la cobertura de InAs depositada. En particular, se observan distintas configuraciones geométricas que evolucionan con dicha cobertura, entre las que destacan arreglos hexagonales compuestos por seis puntos cuánticos. Estos resultados constituyen evidencia experimental de la viabilidad física de configuraciones hexagonales bajo condiciones de crecimiento específicas, lo que respalda el interés en el estudio de este tipo de sistemas.

Más allá de la evidencia experimental, la configuración geométrica de los puntos en el clúster es crucial en la estructura espectral del sistema. Este aspecto es abordado por Gélvez (2019) al analizar una nanoestructura bidimensional conformada por tres QDs acoplados lateralmente, considerando dos configuraciones geométricas distintas y la presencia de campos eléctricos y magnéticos externos. Sin embargo, su estudio se centra en configuraciones uniformes y en un número reducido de QDs, dejando abierta la exploración de sistemas con mayor número de puntos cuánticos y con desorden estructural.

En esta misma línea, Gutiérrez Niño et al. (2025) introduce un parámetro denominado *factor de empaquetamiento* el cual cuantifica el grado de proximidad entre los puntos cuánticos, analizando clústeres bidimensionales conformados por 4, 6, 8 y 12 QDs, mostrando que el espectro de bajas energías se modifica de manera significativa al variar la distancia entre puntos y al aumentar el número de estos en el clúster. Estos resultados evidencian la influencia directa del grado de acoplamiento y del número de puntos en la estructura electrónica del sistema. No obstante, el análisis se restringe a configuraciones estructuralmente uniformes y considera únicamente la influencia del campo eléctrico, sin abordar el efecto de campos magnéticos ni la introducción de

desorden estructural en arreglos geométricos específicos.

De manera más reciente, Naranjo Rendón (2025) amplió el estudio hacia configuraciones moleculares circulares modeladas mediante curvas epicicloides e hipocicloides utilizando el software COMSOL Multiphysics. En dicho trabajo se investigaron los efectos de la geometría, la composición del material y los campos externos sobre las propiedades electrónicas, ópticas y termodinámicas del sistema.

En conjunto, estos estudios evidencian un avance progresivo en la comprensión teórica de los sistemas de puntos cuánticos, donde la geometría y la interacción entre los puntos juegan un papel decisivo en la determinación de sus propiedades cuánticas emergentes. Sin embargo, a pesar del desarrollo de esta línea de investigación, no se encontraron trabajos sobre clústeres con geometría hexagonal que analicen de forma teórica sus propiedades electrónicas al considerar explícitamente variaciones en el tamaño de los QDs.

Esta situación resulta particularmente relevante si se tiene en cuenta que durante los procesos de crecimiento y autoensamblaje de puntos cuánticos es poco probable obtener estructuras perfectamente uniformes, dado que pequeñas variaciones en las condiciones de deposición o en los mecanismos de autoorganización pueden generar diferencias en el tamaño o la forma de los QDs individuales. Esto introduce un desorden estructural que modifica la energía de confinamiento y, por ende, las propiedades electrónicas del sistema.

Aunque el efecto del desorden ha sido estudiado en sistemas de puntos cuánticos aislados, su impacto en clústeres con geometrías específicas aún no se comprende completamente. En particular, resulta de interés analizar cómo variaciones en el tamaño de uno de los QDs dentro de un clúster hexagonal de puntos cuánticos acoplados afectan la estructura espectral y la distribución espacial de los estados electrónicos, así como la influencia del grado de acoplamiento entre los puntos y su respuesta ante campos eléctricos y magnéticos externos.

Modelo Teórico

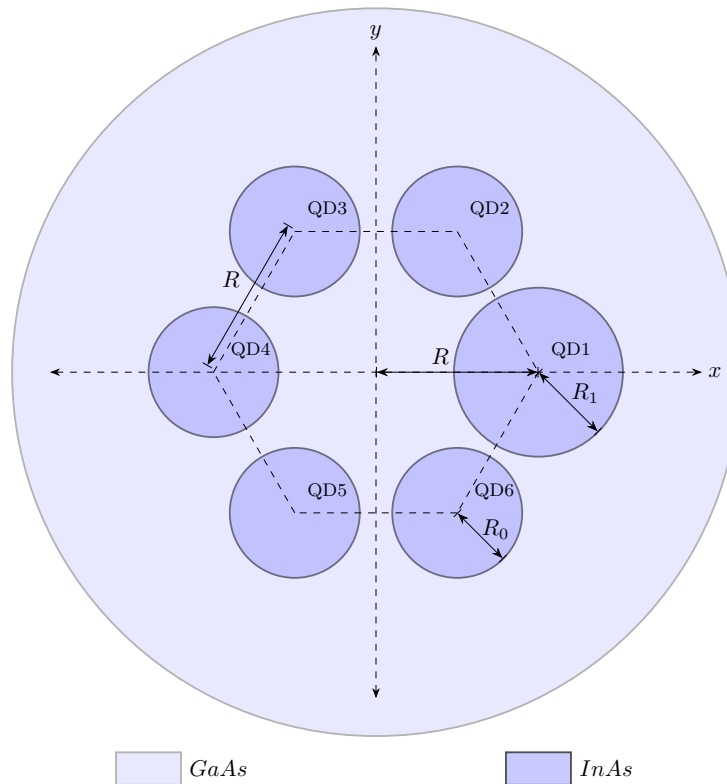
Con el objetivo de explorar el impacto del desorden estructural sobre las propiedades electrónicas de QDCs, se propone el estudio teórico de un único electrón de conducción confinado en un clúster cíclico bidimensional (2D) de forma hexagonal. El análisis se realiza en dos dimensiones, dado que los SAQDs suelen presentarse como capas delgadas que poseen una relación pequeña entre las dimensiones de su altura y su base.

El sistema estará compuesto por seis QDs circulares con un potencial de confinamiento finito y abrupto, lo que favorece el acoplamiento cuántico entre QDs adyacentes. Se adoptará una configuración geométrica en la que sus centros coincidan, en todos los casos, con los vértices de un hexágono regular de radio R ; en consecuencia, la distancia entre centros de QDs adyacentes (lado del hexágono) es también R .

El desorden estructural se introduce mediante la variación del radio de uno de los QDs que conforman el clúster, designado como QD1, mientras que los demás mantienen un radio uniforme. De esta manera, $R_i = R_0$ para $i = 2, \dots, 6$ y $R_1 \neq R_0$ (ver Figura 3). Asimismo, se considerarán distintos regímenes de acoplamiento asociados al grado de proximidad entre los puntos. Dichos regímenes estarán caracterizados por un parámetro de acoplamiento, cuya definición será presentada más adelante.

Figura 3

Esquema de la vista superior de un clúster hexagonal de seis QDs de InAs en una matriz de GaAs



Nota. Los QDs se ubican en los vértices de un hexágono regular de radio R , donde el radio de los QDs es $R_i = R_0$ con $i = 2, \dots, 6$ y $R_1 \neq R_0$ para el QD1.

El desarrollo del modelo teórico se basa en las aproximaciones discutidas previamente en el marco teórico. Bajo esta consideración, el sistema es modelado dentro de la aproximación de masa efectiva y función envolvente. Además, se considera una heteroestructura InAs/GaAs, en la cual el material de la matriz (GaAs) actúa como barrera de potencial finita la cual confina al electrón de las regiones de InAs, En este marco, la masa efectiva del electrón se toma como $m_{InAs}^* = 0.023m_e$ –donde m_e es la masa del electrón– en el interior de los QDs y $m_{GaAs}^* =$

$0.067m_e$ en la matriz circundante, mientras que la barrera de potencial se considera de altura $V_0 = 0.7 \text{ eV}$, correspondiente al desplazamiento de la banda de conducción entre ambos materiales (Vurgaftman et al., 2001).

El confinamiento estructural impuesto sobre el electrón se modela para cada QD como un pozo de potencial bidimensional circular finito, esto es:

$$V(x, y) = \begin{cases} 0, & \text{dentro de los QDs} \\ V_0, & \text{fuera de los QDs} \end{cases} \quad (1)$$

El comportamiento electrónico del sistema se describe mediante la ecuación de Schrödinger, expresada como:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2} \nabla \cdot \left(\frac{1}{m^*} \nabla \right) + V(x, y) + \frac{e^2 B^2}{8m^*} (x^2 + y^2) + \frac{i\hbar e B}{2m^*} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + eFx \right] \psi = E\psi, \quad (2)$$

donde m^* es la masa efectiva del electrón en el material, $V(x, y)$ es el potencial de confinamiento definido por la heteroestructura, B es la magnitud del campo magnético externo aplicado perpendicular al plano del QDC y F la intensidad del campo eléctrico aplicado en dirección del eje x . El tercer y cuarto término corresponden, respectivamente, a las contribuciones diamagnética y paramagnética, mientras que el último término representa la interacción del electrón con el campo eléctrico externo.

Método de Solución

Debido a que la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo (2) para este sistema no admite solución analítica exacta, se recurre a un método numérico para resolverla y así obtener el espectro de energías, lo que permite analizar las propiedades electrónicas en los diferentes casos de desorden estructural.

El software COMSOL Multiphysics® es una plataforma de simulación que ofrece un entorno de modelado multifísico completamente acoplado, integrando todas las etapas del flujo de trabajo computacional: desde la definición de la geometría y la asignación de propiedades de los materiales, hasta la formulación de las ecuaciones físicas que describen el fenómeno de interés, la ejecución de los cálculos numéricos y el análisis de los resultados obtenidos (COMSOL, 2026). Adicionalmente, esta herramienta permite resolver ecuaciones diferenciales parciales (PDE, Partial Differential Equations) mediante el método de elementos finitos (FEM, Finite Element Method), ya que dichas ecuaciones pueden formularse en una forma general basada en coeficientes, facilitando su implementación numérica dentro del entorno del software. Es por esta razón que se empleó COMSOL Multiphysics® para la resolución del problema planteado.

Por lo anterior, se escribió la ecuación 2 como una ecuación diferencial en forma de coeficientes de la siguiente forma:

$$\lambda^2 e_a u - \lambda d_a u + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f. \quad (3)$$

Con el fin de trabajar en unidades de eV, la ecuación se normalizó dividiéndola por la carga del electrón e . Como resultado, los coeficientes en la ecuación 3 corresponden a los definidos a

continuación:

$$\left\{ \begin{array}{l} e_a = 0 \\ d_a = 1 \\ c = \frac{\hbar}{2m^*e} \\ \alpha = [0, 0] \\ \gamma = [0, 0] \\ \beta = \frac{i\hbar B}{2m^*} [-y, x] \\ a = V_0 + \frac{eB^2}{8m^*} (x^2 + y^2) + Fx \\ f = 0 \end{array} \right. \quad (4)$$

El método utilizado por este software para resolver las PDE (FEM), consiste en subdividir el dominio espacial del problema en regiones muy pequeñas denominadas elementos finitos, mediante una discretización espacial que se implementa con la construcción de una malla. De este modo, el dominio numérico para la solución tiene ahora un número finito de puntos. En cada elemento se plantea una aproximación local de la solución, y posteriormente estas contribuciones se ensamblan en un sistema global de ecuaciones algebraicas que modela el problema original. Finalmente, el método obtiene una solución aproximada minimizando el funcional de error asociado, en el marco del cálculo variacional.

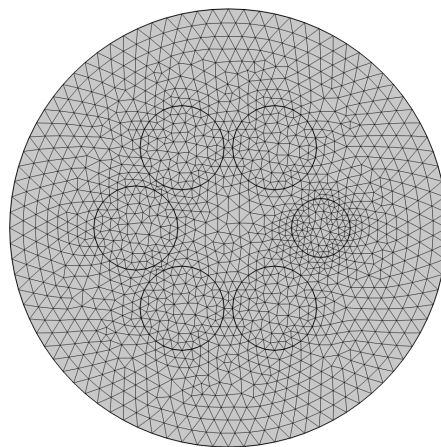
Una propiedad a destacar del FEM es su convergencia: si se consideran elementos cada vez más pequeños, la solución numérica calculada tiende a aproximarse a la solución exacta del problema. En otras palabras, una malla más refinada dará lugar a resultados más precisos. No obstante, dependiendo del problema físico y de la estrategia de mallado implementada, es posible obtener soluciones suficientemente precisas con una malla moderadamente refinada, ya que un refinamiento adicional puede producir únicamente pequeñas variaciones numéricas en los valores calculados, a costa de un mayor esfuerzo computacional.

Dado que la geometría y las características físicas del problema en cuestión no requieren

un refinamiento local específico ni una estrategia manual de mallado, se usó la opción de mallado denominada *physics-controlled mesh* proporcionada por COMSOL Multiphysics®, la cual determina automáticamente una estrategia de mallado adecuada en función de la física del problema. En el caso bidimensional, la discretización se realiza mediante elementos triangulares de primer orden, los cuales son la opción estándar debido a su adecuada adaptación a diversas geometrías (Frei, 2013). Además, se empleó el nivel de refinamiento denominado “más fina”, correspondiente a una configuración predeterminada de mayor densidad de elementos. En la Figura 4 se muestra el mallado utilizado en la simulación.

Figura 4

Mallado bidimensional con elementos triangulares correspondiente al nivel de refinamiento “más fina” utilizado en la simulación.



Análisis de Resultados

En este capítulo se presentan los resultados obtenidos a partir de los cálculos realizados para el sistema en estudio. Las secciones se organizan según el efecto físico analizado, incluyendo en cada caso la correspondiente discusión. En la primera se estudia el efecto del régimen de acoplamiento y de la no uniformidad sobre el espectro de bajas energías, mediante el barrido de la separación entre centros de QDs adyacentes para distintos casos de no uniformidad, y a través de la variación del tamaño del QD1 para diferentes regímenes de acoplamiento. En la segunda y tercera, se analiza el efecto de los campos externos eléctrico y magnético aplicados, respectivamente, para diferentes valores de R y R_1 .

4.1 Efecto del Acoplamiento y la No Uniformidad


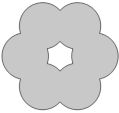
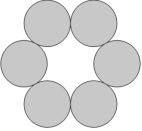
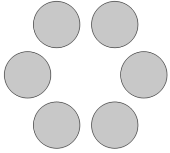
A continuación se presentan los resultados obtenidos para un electrón de conducción confinado en un clúster hexagonal de puntos cuánticos circulares de radio $R_0 = 10$ nm. El objetivo es analizar el espectro de bajas energías en función del grado de acoplamiento y del desorden estructural, considerando distintos casos de no uniformidad y diferentes regímenes de acoplamiento. Para ello, se introducen dos parámetros adimensionales que permiten caracterizar el sistema y realizar el análisis paramétrico. En primer lugar, se define el parámetro γ como la relación entre la separación centro-centro de QDs adyacentes y el radio R_0 , así:

$$\gamma = \frac{R}{R_0}.$$

Para valores de $\gamma \lesssim 1$ el sistema corresponde a un único QD con geometría modificada (no circular). Para $1 < \gamma < 2$ ya se logra distinguir la geometría de clúster y el sistema se encuentra en un régimen de acoplamiento fuerte, mientras que el acoplamiento es débil cuando $2 \leq \gamma < 2.25$, y se considera sin acoplamiento para $\gamma \geq 2.25$ ya que la separación entre centros de QDs adyacentes es mayor en comparación a su radio. En la Figura 5 se puede observar la geometría del clúster hexagonal para los diferentes casos de acoplamiento.

Figura 5

Configuraciones representativas del clúster para distintos regímenes de acoplamiento

QD con geometría modificada	Acoplamiento fuerte	Acoplamiento débil	Sin acoplamiento
$\gamma \lesssim 1$	$1 < \gamma < 2$	$2 \leq \gamma < 2.25$	$\gamma \geq 2.25$
			
$\gamma = 1$	$\gamma = 1.5$	$\gamma = 2$	$\gamma = 2.5$

Nota. Las configuraciones ilustradas se presentan para el caso de clúster hexagonal uniforme ($R_1 = R_0$). No obstante, los rangos de γ que definen cada régimen de acoplamiento se mantienen válidos para todos los casos de desorden estructural estudiados. Los valores de γ mostrados corresponden a casos representativos dentro de cada régimen de acoplamiento (el primero no será estudiado a fondo).

Adicionalmente, los diferentes casos de desorden estructural a analizar están determinados por un parámetro adimensional relacionado con el radio del QD1, el cual se define como

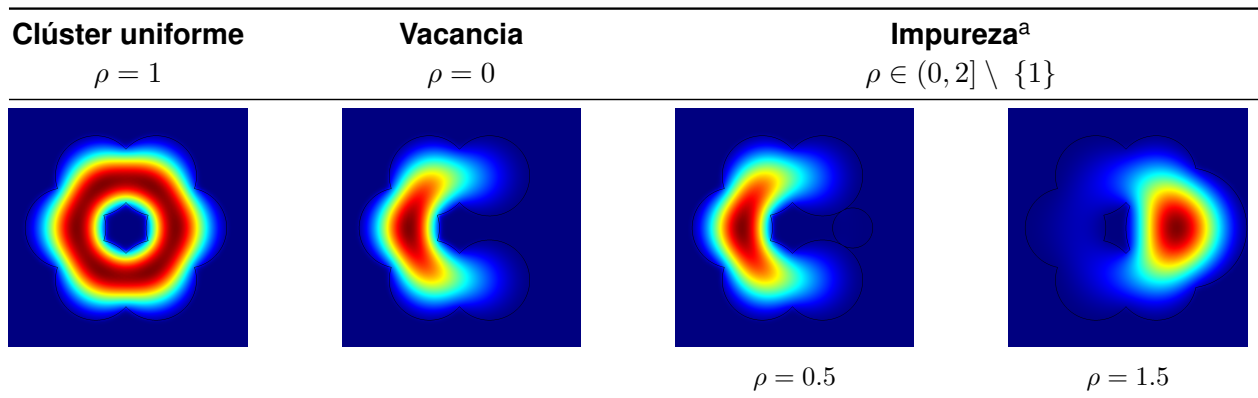
$$\rho = \frac{R_1}{R_0},$$

donde R_1 corresponde al radio del QD1 y R_0 al radio de los demás QDs del clúster.

Cuando $R_1 = R_0$ ($\rho = 1$), el sistema corresponde a un clúster hexagonal sin desorden estructural (caso uniforme). En cambio, para $\rho \neq 1$ se introduce desorden estructural en el sistema. En particular, para $\rho = 0$ se obtiene el caso de un clúster hexagonal con una vacancia, mientras que para $\rho \in (0, 2] \setminus \{1\}$ se obtiene un clúster con una impureza asociada a la variación de R_1 . Este último caso de desorden es análogo a la presencia de impurezas en sólidos cristalinos, donde la sustitución de un átomo por otro con propiedades distintas modifica el potencial local y, en consecuencia, las propiedades electrónicas del sistema. Con el fin de caracterizar los distintos casos de desorden estructural, se analizan las densidades de probabilidad electrónica asociadas a cada configuración. En la Figura 6 se muestran estas distribuciones para distintos valores de ρ , considerando el régimen de acoplamiento fuerte.

Figura 6

Densidad de probabilidad electrónica para diferentes casos de desorden estructural



Nota. Las densidades de probabilidad mostradas corresponden al régimen de acoplamiento fuerte con $\gamma = 1.5$. No obstante, los valores de ρ que definen cada caso de desorden se mantienen válidos para cualquier otro régimen de acoplamiento.

^a Los valores de ρ mostrados para el caso de impureza corresponden a situaciones en las que el radio del QD1 es menor y mayor que el de los demás QDs del clúster, respectivamente.

Nótese que para el caso de vacancia y el caso de impureza con $\rho = 0.5$ la densidad de probabilidad presenta una distribución muy similar. Por esta razón, en los análisis posteriores solo se consideran tres casos representativos: el clúster uniforme ($\rho = 1$), el caso de vacancia ($\rho = 0$) y el caso de impureza con $\rho = 1.5$.

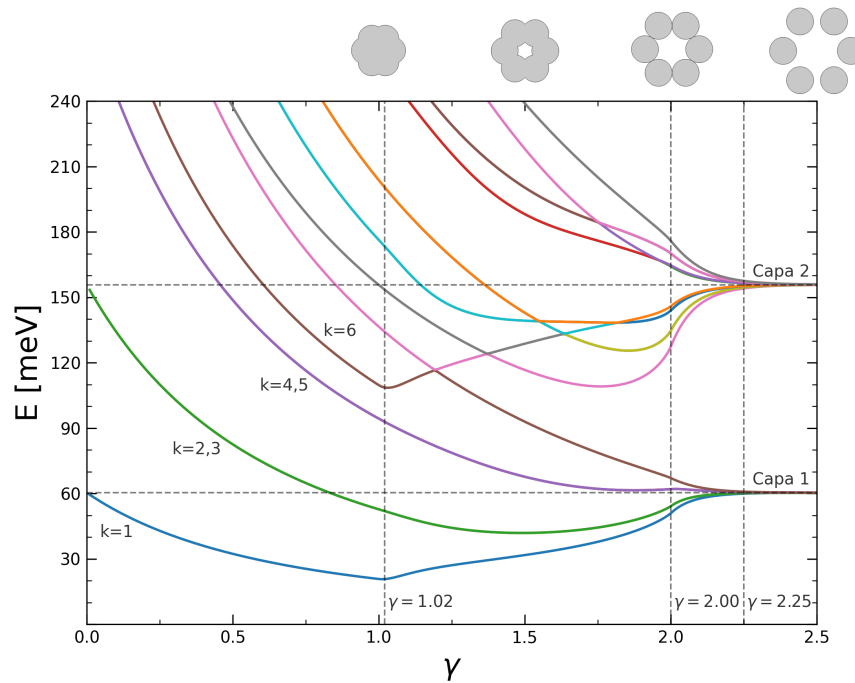
De esta manera, el sistema queda caracterizado por dos parámetros adimensionales: γ , asociado al acoplamiento, y ρ , relacionado con el desorden estructural. Así, se procede al análisis del espectro de bajas energías en función del parámetro de acoplamiento. Como primer paso, y con el fin de validar los resultados obtenidos mediante el método numérico, se compara el caso de clúster uniforme con los resultados reportados por Gutiérrez Niño et al. (2025). Se encuentra que el comportamiento del espectro reproduce las mismas tendencias generales, con diferencias en los valores de energía debido al uso de materiales distintos en el sistema considerado.

Una vez establecida la consistencia de los resultados con lo reportado en la literatura, se procede al análisis detallado de la estructura del espectro obtenido, mostrado en la Figura 7. En esta se pueden identificar los diferentes regímenes de acoplamiento, delimitados mediante líneas verticales punteadas, lo que permite evidenciar con mayor claridad los cambios en el espectro al variar el parámetro de acoplamiento.

Antes de analizar en detalle el comportamiento del espectro mostrado en la Figura 7, resulta necesario considerar la simetría del sistema, ya que esta permite comprender el desplazamiento, la degeneración y la división de los niveles de energía. El grupo de simetrías de un polígono regular de N lados corresponde al grupo diedral D_N , el cual consta de $2N$ operaciones de simetría: N rotaciones y N reflexiones. Dado que el sistema estudiado corresponde a un clúster hexagonal regular de puntos cuánticos circulares idénticos y axialmente simétricos, su grupo de simetría es el diedral D_6 .

Figura 7

Espectro de bajas energías en función del parámetro de acoplamiento en el clúster hexagonal uniforme



En el límite, cuando la separación entre QDs adyacentes, R , es mucho mayor que el radio de los QDs, R_0 , ($\gamma > 2.25$) no existe acoplamiento entre los puntos cuánticos por lo que estos pueden considerarse independientes y con propiedades idénticas. Por otro lado, si la separación entre los QDs que conforman el clúster es nula, estos se superponen completamente, dando lugar a un único QD circular. En ambos casos, los niveles de energía corresponden a los de un QD circular de radio R_0 aislado. En particular, para el caso de seis QDs no acoplados, la energía más baja se encuentra seis veces degenerada, como se evidencia en las líneas horizontales de la Figura 7. Por consiguiente, presenta simetría rotacional continua C_∞ , por lo que los niveles de energía son los mismos que para un pozo cuántico bidimensional circular de barrera finita, es decir, $E_{n,m}$, donde n y m son los números cuánticos radial y angular, respectivamente.

En consecuencia, para valores de $m \neq 0$ los niveles presentan degeneración doble. Por otra parte, para casos intermedios, correspondientes a separaciones entre QDs comparables con su tamaño y en las que el acoplamiento entre ellos es apreciable, la simetría rotacional continua se rompe y el sistema queda descrito por la simetría discreta del clúster poligonal que, en general, para un clúster de N puntos cuánticos (con N par), existen $N/2 + 1$ niveles de energía, de los cuales $N/2 - 1$ son doblemente degenerados.

Tomando en cuenta lo que se ha presentado anteriormente, para $\gamma = 0$ (caso de un único QD circular) los estados se etiquetan –usando la notación de orbitales atómicos, ya que el punto cuántico puede considerarse como un átomo artificial– como $1s$, $1p$, $1d$, $2s$, $1f$, $2p$, etc. En el régimen sin acoplamiento ($\gamma \geq 2.25$), cada nivel de energía corresponde a los del caso anterior, pero aparece repetido tantas veces como puntos cuánticos conforman el clúster. Así pues, los orbitales del sistema considerado se organizan en capas de acuerdo con la naturaleza de los orbitales de cada QD individual. La capa de tipo s está conformada por los 6 estados que surgen de la mezcla de orbitales s de QDs individuales, y la tipo p por los 12 estados que surgen de la mezcla de orbitales $1p_x$ y $1p_y$ de cada QD individual.

Los números cuánticos radial y angular que caracterizan a un único QD circular dejan de ser apropiados para describir los estados del sistema, dado que este no posee, en general (para cualquier γ), simetría circular. Por lo tanto, se denotan las autofunciones y los autovalores del sistema molecular como Ψ_i^k y E_i^k , respectivamente, donde i corresponde al número de la capa y k indica el orden del orbital dentro de dicha capa. Con esta notación, los estados correspondientes se etiquetan como (i, k) . Asimismo, las capas de tipo s y p mencionadas anteriormente corresponden a las capas $i = 1$ e $i = 2$, respectivamente.

Con todas estas consideraciones en mente, es posible analizar el comportamiento del espectro mostrado en la Figura 7. Para una mejor comprensión, se partirá del clúster hexagonal

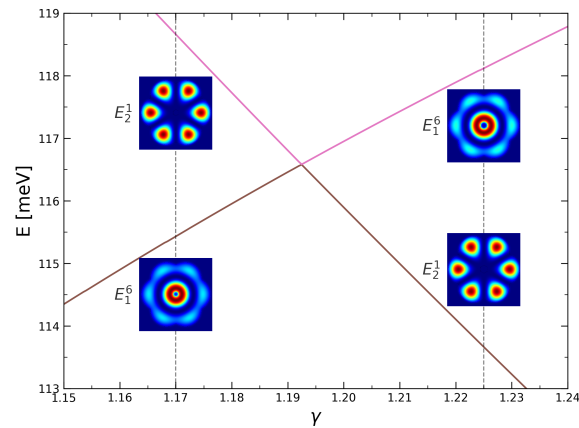
de puntos cuánticos no acoplados y se analizará la figura de derecha a izquierda, aumentando progresivamente el acoplamiento entre los QDs.

Para $\gamma = 2.5$, todos los seis niveles que conforman la capa 1 se encuentran prácticamente degenerados en un valor correspondiente a la energía del estado más bajo de un QD circular. A medida que disminuye la separación entre centros de QDs adyacentes comienza a darse un acoplamiento cuántico entre estos y el sistema pasa del régimen sin acoplamiento hasta regímenes de acoplamiento débil y posteriormente fuerte, dando lugar al desdoblamiento de los niveles de energía a causa de la formación de orbitales moleculares de distinta naturaleza, que pueden clasificarse de carácter enlazante y antienlazante, dependiendo de la distribución espacial de la función de onda. Debido a la simetría del sistema, estos seis estados se reorganizan en cuatro niveles de energía distintos, de los cuales dos son doblemente degenerados, correspondientes a $k = 2, 3$ y $k = 4, 5$, como puede observarse en la figura. Además, los orbitales moleculares Ψ_1^k con $k = 1, 2, 3$ tienen un mínimo en forma de pozo, la energía de ellos baja y luego sube, mientras que con $k = 4, 5, 6$ la energía solo sube.

Debido a que Ψ_1^6 es de carácter antienlazante, su energía aumenta al acoplar los puntos cuánticos, hasta cruzarse con la de un estado de la segunda capa, cuyo nivel de energía disminuye con γ . Esta condición es necesaria para una posible interacción entre los estados asociados. En la Figura 8 se presenta un acercamiento a la región de cruce, junto con las densidades de probabilidad asociadas a estos niveles. Allí se evidencia un cruce, lo cual indica que dichos estados no interactúan debido a diferencias en su simetría. Por ello, ambos niveles evolucionan de manera independiente, permitiendo el cruce en concordancia con el teorema de von Neumann–Wigner.

Figura 8

Acercamiento a la región de cruce de niveles de energía



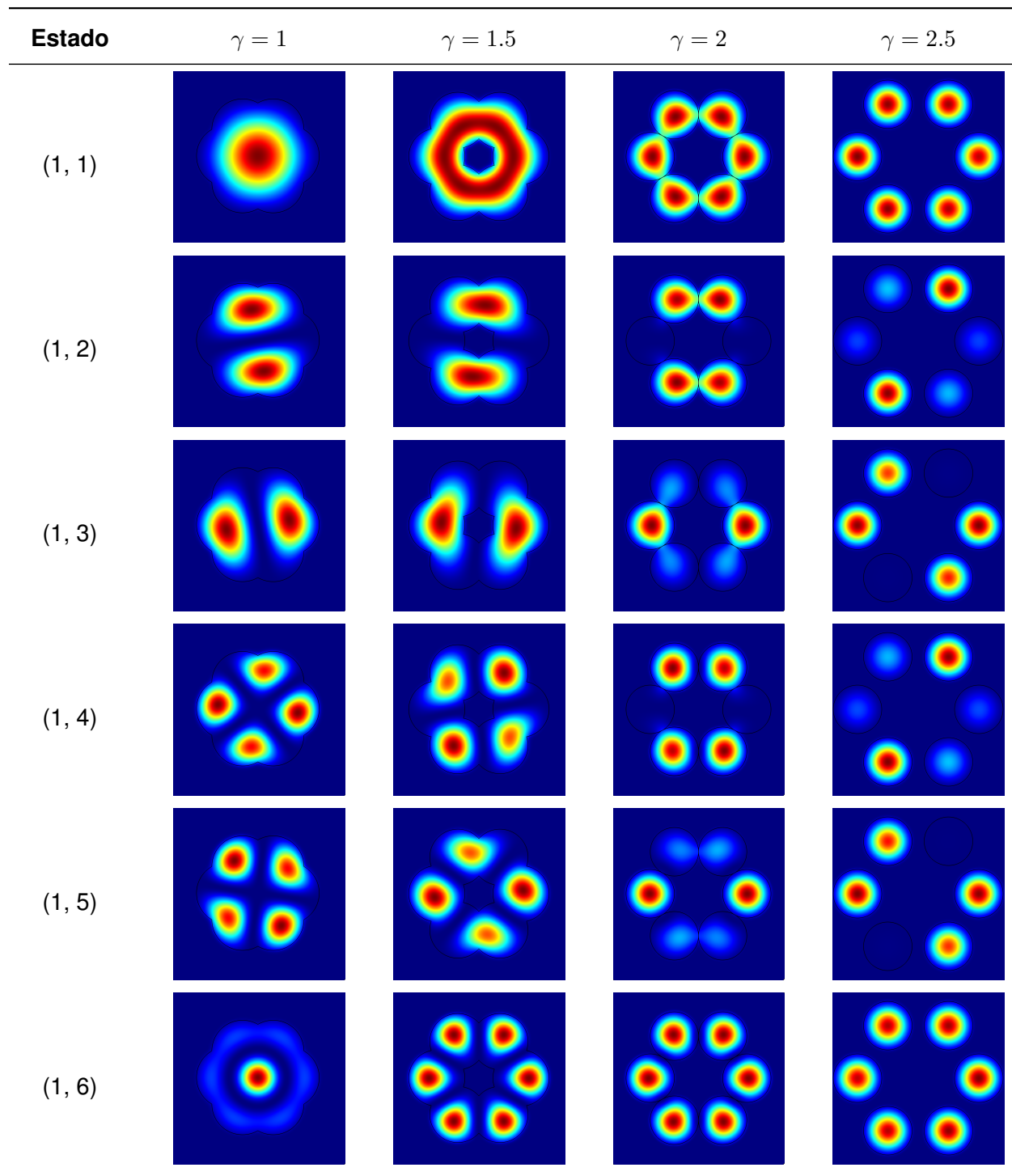
Nota. Detalle del espectro de energías de la Figura 7 para un clúster hexagonal uniforme en función de γ , con sus densidades de probabilidad asociadas.

Un aspecto interesante es que, alrededor de $\gamma \approx 1$, se observa un cambio en el comportamiento del espectro para algunos estados. Esto se debe a que, cuando la separación entre QDs es igual a su radio ($R = R_0$), la cavidad central, que confiere al sistema el carácter de clúster cíclico o de cadena cerrada, desaparece, lo que implica un cambio en la topología de la estructura del sistema: este pasa de ser doblemente conexo a simplemente conexo. Dicho cambio afecta a los estados con $k = 1$ y $k = 6$ de la primera capa. Para comprender por qué esto ocurre, resulta útil analizar las densidades de probabilidad de cada estado, mostradas en la Figura 9.

Se observa que, en ausencia de la cavidad central ($\gamma = 1$), estos estados presentan un máximo de densidad de probabilidad en el centro. Sin embargo, al formarse la cavidad, el máximo en la densidad de probabilidad se desplaza desde el centro hacia una región anular alrededor debido a que se forma una barrera de potencial en dicha región, lo cual incrementa el confinamiento y, en consecuencia, también la energía cinética.

Figura 9

Densidades de probabilidad electrónica para un electrón en un clúster hexagonal uniforme para distintos valores de γ

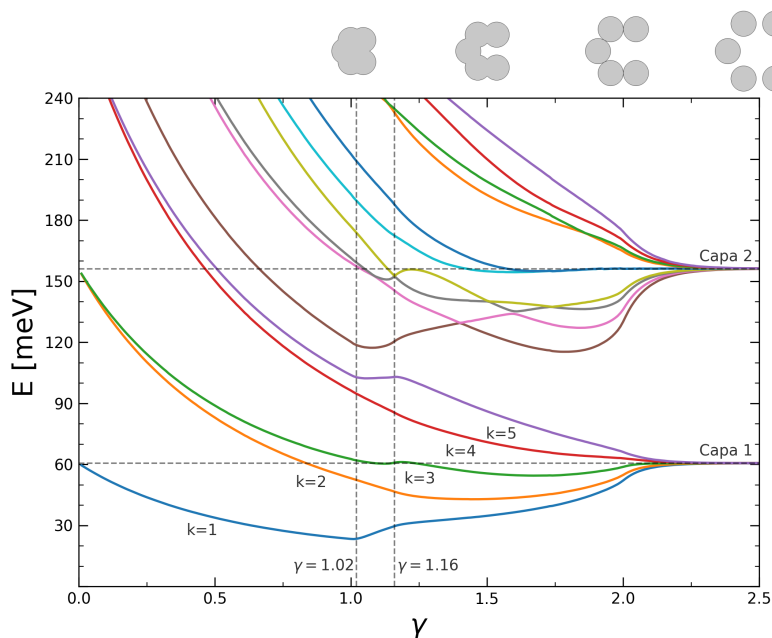


Finalmente, para el régimen en el que el clúster se comporta como un único QD, los niveles de energía aumentan conforme el confinamiento se intensifica. Esto debido a que, al reducir el espacio disponible para el electrón, este debe aumentar su energía. Así, en el límite $\gamma = 0$, los niveles de energía reproducen la estructura espectral de un único QD circular.

Una vez descrito el caso del clúster uniforme, se considera el caso de vacancia ($\rho = 0$), en el cual se elimina el QD1. Esta modificación rompe la simetría del sistema y, en consecuencia, la degeneración de los niveles de energía. En la Figura 10 se muestra el espectro correspondiente.

Figura 10

Espectro de bajas energías en función del parámetro de acoplamiento en el clúster hexagonal para el caso de vacancia



En general, el comportamiento del espectro de energías para el caso de vacancia respecto al caso uniforme es similar. En particular, se recuperan configuraciones degeneradas en los casos extremos $\gamma = 0$ y $\gamma \geq 2.25$. Aunque la estructura de capas se conserva, en este último caso se

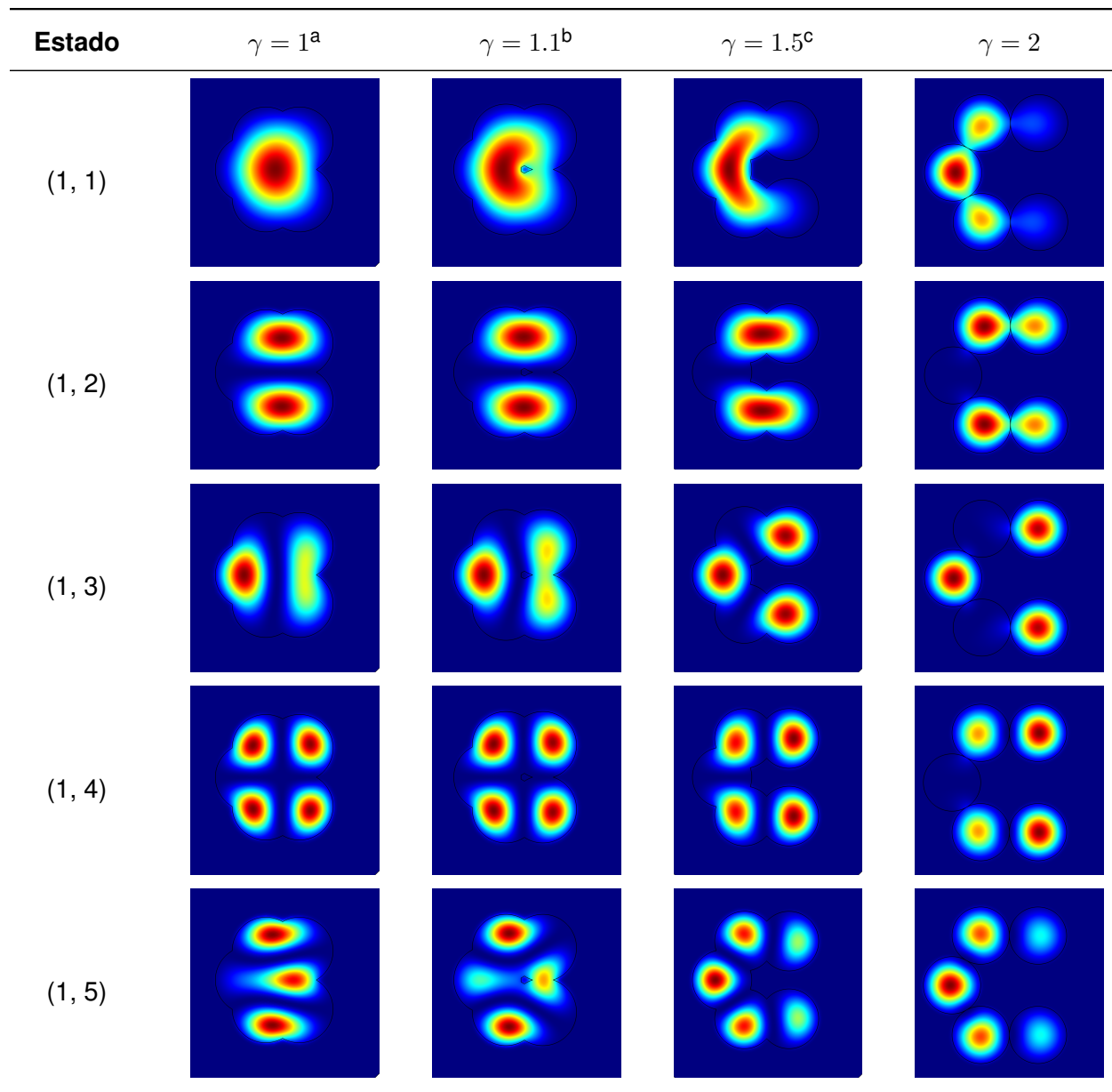
presenta un nivel degenerado menos debido a la ausencia de uno de los puntos que conformaban originalmente el clúster hexagonal. Por ello, el número de niveles por capa difiere del caso uniforme: se obtienen cinco niveles en la primera capa y diez en la segunda, los cuales no presentan degeneración como consecuencia del rompimiento de la simetría del sistema.

Adicionalmente, se observa que algunos niveles de energía presentan cambios en su comportamiento alrededor de $\gamma \approx 1$, mientras que otros los presentan cerca de $\gamma \approx 1.16$ a causa de modificaciones en la topología del sistema. A diferencia del caso uniforme, en el que se tenía un solo cambio topológico, en el caso de vacancia se identifican dos: *i)* el sistema pasa de ser simplemente conexo a doblemente conexo cuando empieza a formarse una cavidad central ($\gamma \approx 1$); y *ii)* el sistema vuelve a ser simplemente conexo cuando los QDs 2 y 6 (véase Figura 3) dejan de solaparse, lo cual ocurre cuando $\sqrt{3}R \approx 2R_0$, es decir, para $\gamma \approx 1.16$. Para comprender la razón de estos cambios, resulta útil analizar las densidades de probabilidad asociadas a cada estado, las cuales se muestran en la Figura 11.

Es posible observar que, en ausencia de la cavidad central ($\gamma = 1$), los estados $(1, 1)$ y $(1, 5)$ presentan una densidad de probabilidad diferente de cero en el centro. Mientras que al formarse la cavidad ($\gamma = 1.1$), dicha densidad se reduce significativamente en esa región sin anularse estrictamente, lo que implica un mayor confinamiento del electrón y, con ello, un incremento en su energía. Asimismo, para $\gamma = 1.1$, en los estados $(1, 3)$ y $(1, 5)$, el electrón presenta probabilidad de encontrarse en el lado derecho del clúster. Sin embargo, al aumentar γ hasta aproximadamente 1.16, los QDs 2 y 6 dejan de solaparse, por lo que desaparece la cavidad central y, además, el área disponible para el electrón aumenta, lo que conlleva un menor confinamiento sobre este y, por tanto, una reducción en su energía.

Figura 11

Densidades de probabilidad electrónica para un electrón en el clúster hexagonal con vacancia para distintos valores de γ



^a Sin cavidad central.

^b Con cavidad central.

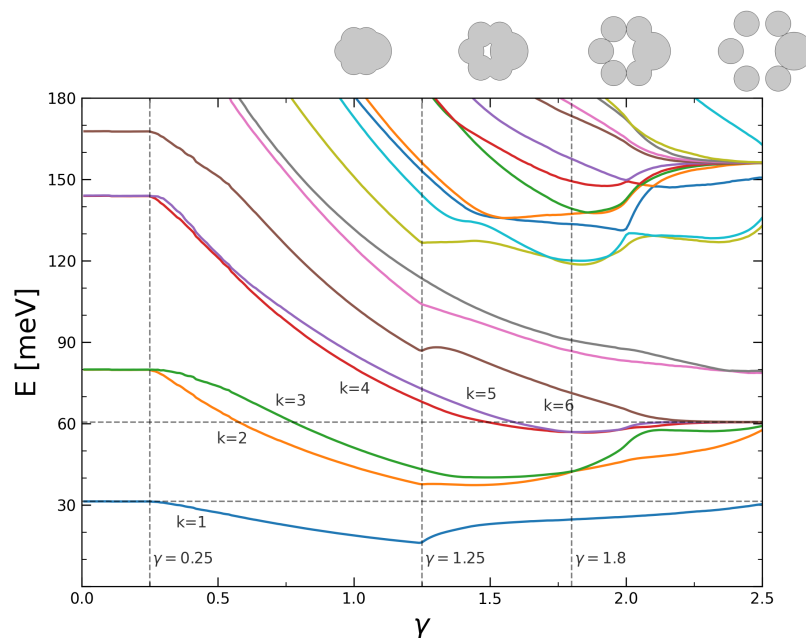
^c Sin cavidad central y sin solapamiento entre los QDs 2 y 6.

Por otro lado, en las densidades de probabilidad mostradas en la Figura 11 se aprecian claras diferencias con respecto a las densidades del caso uniforme debido a la ruptura de la geometría cíclica del clúster, lo cual lleva a que los orbitales s se mezclen de manera diferente y lleven a la formación de estados más localizados alrededor del QD4.

Se considera ahora el caso donde uno de los QDs actúa como una impureza debido a que su radio difiere del de los demás. Se analiza el caso en el que dicho radio es mayor, $R_1 = 1.5R_0$. En la Figura 12 se muestra el espectro de energías correspondiente al caso de impureza ($\rho = 1.5$).

Figura 12

Espectro de bajas energías en función del parámetro de acoplamiento en el clúster hexagonal para el caso de impureza ($\rho = 1.5$)



Con respecto a los casos anteriores, un primer rasgo notable es que, pese a presentarse la degeneración en $\gamma = 0$, los valores de energía son menores y, además, permanecen constantes hasta $\gamma = 0.25$ porque cuando la distancia $2R + R_0$ (medida desde el centro del QD1 hasta el borde exterior del QD4) es menor que $R_1 = 1.5R_0$, el QD1 contiene completamente a los demás QDs.

Por ello, para $\gamma \leq 0.25$, el clúster hexagonal puede considerarse como un único punto cuántico circular de radio $1.5R_0$ y, dado que en los casos anteriores se tenía un radio R_0 , el confinamiento ahora es menor, lo que da lugar a energías más bajas en comparación con dichos casos.

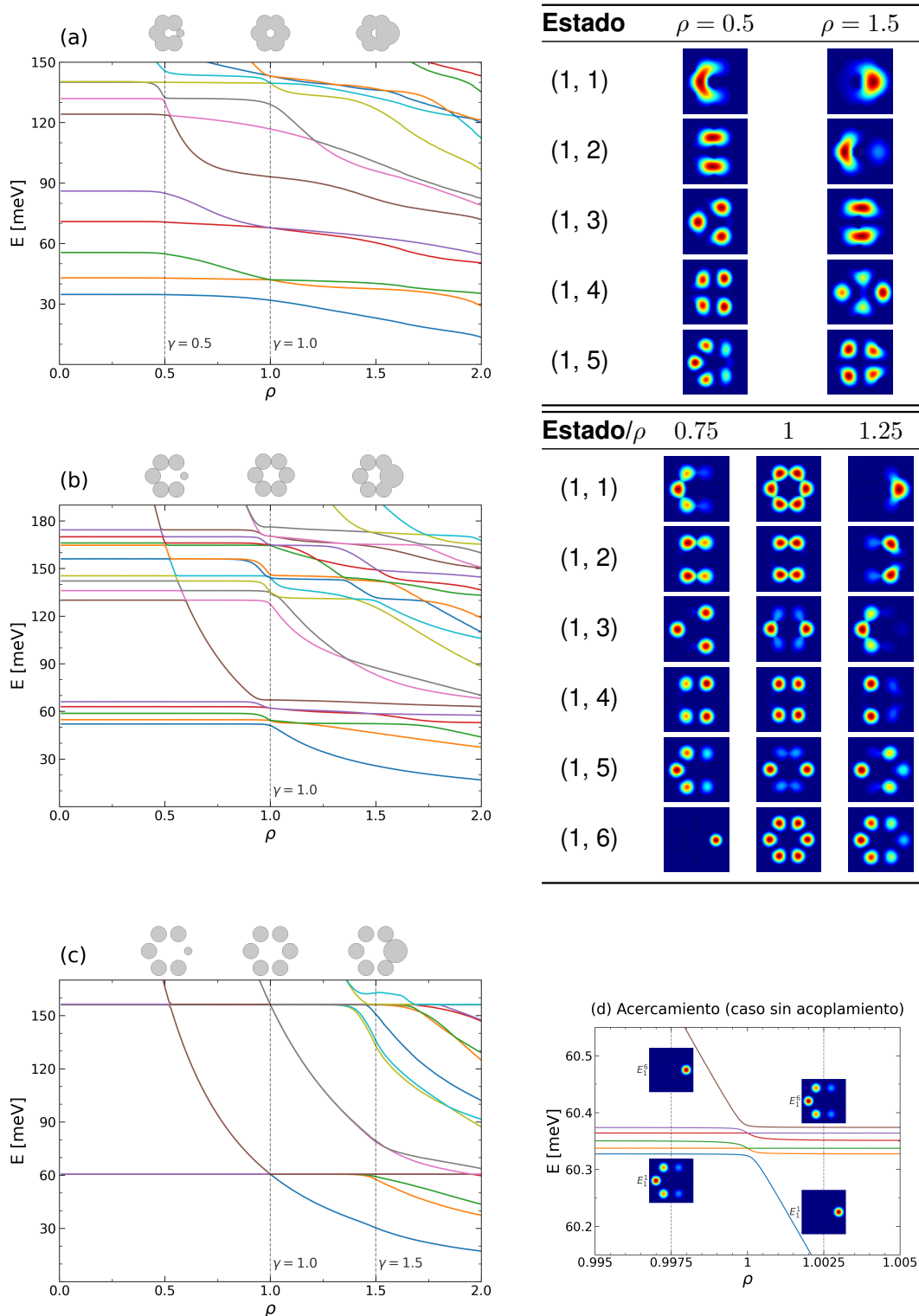
Otro aspecto a destacar es la ligera deformación de la estructura de capas, lo cual puede notarse en el régimen sin acoplamiento. Allí, el nivel de energía base retorna al valor inicial que presenta en $\gamma = 0$, pero los demás niveles no. En particular, los últimos tres niveles de la primera capa convergen a un mismo valor de energía, correspondiente a la energía base de un único QD de radio R_0 , por lo que pueden asociarse a los QDs 3, 4 y 5. Por otro lado, los niveles correspondientes a $k = 2$ y $k = 3$ se encuentran a energías ligeramente menores, lo cual sugiere que están asociados a los QDs adyacentes a la impureza (QDs 2 y 6) dado que aún presentan solapamiento con el QD1 en este régimen. Además, también ocurre un cambio topológico similar al del caso uniforme. Este se da cuando la distancia entre los centros de los QDs 1 y 4, $2R$, es igual a $R_0 + 1.5R_0$, es decir, cuando $\gamma = 1.25$. En estas condiciones, los estados $(1, 1)$ y $(1, 6)$, que presentan una alta probabilidad de localización en el centro, exhiben un cambio brusco en su comportamiento, reflejado en un incremento de su energía, mientras que en el estado $(1, 3)$, cuya probabilidad en el centro es menor (pero no nula), dicho cambio ocurre de manera más suave.

Se observan, además, cruces entre los niveles de la primera capa correspondientes a $k = 2$ y 3, así como entre $k = 4$ y 5 (por ejemplo, alrededor de $\gamma = 1.8$), lo cual se atribuye a que dichos estados poseen distinta simetría. En contraste, los niveles $k = 3$ y 4 presentan anticruces, debido a que comparten la misma simetría y esto lleva a una repulsión entre niveles.

Ahora, se sigue con el análisis del espectro de bajas energías en función del parámetro relacionado con el desorden estructural, ρ . En la Figura 13 se muestran estos espectros para los distintos casos de acoplamiento, las densidades de probabilidad correspondientes a los dos primeros casos y un acercamiento del espectro para el régimen sin acoplamiento.

Figura 13

Espectro de bajas energías en función de ρ en el clúster hexagonal bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo, con sus respectivas densidades de probabilidad



Los resultados presentados en la Figura 13 son consistentes con el comportamiento de los espectros ya analizados en los casos de clúster uniforme, con vacancia y con impureza para los diferentes regímenes de acoplamiento. Sin embargo, estos gráficos en función del parámetro ρ , que modula el grado de desorden, revelan algunos aspectos que las Figuras 7, 10 y 12 no evidenciaban. El aspecto más interesante está relacionado con el mecanismo que propicia la transformación de un espectro de cinco niveles, desde el caso de clúster con vacancia ($\rho = 0$), a un espectro con 6 niveles.

De la Figura 13(b) se observa cómo a medida que el radio del QD1 se va incrementando, un nivel de energía superior (color marrón) desciende rápidamente desde la segunda capa de energías y llega a acercarse lo suficiente a la primera capa para interactuar con el nivel $k = 5$ y establecerse un anticruce. Los gráficos de densidad de probabilidad correspondientes al régimen de acoplamiento débil (a la derecha de (b)) revelan la razón de este comportamiento. Poniendo la atención en el estado $(1, 6)$, para cuando $\rho = 0.75$ se aprecia cómo este estado corresponde a un orbital s , para el cual solo existe probabilidad de encontrar el electrón en el QD1 –que es el más pequeño de los seis–, dicha configuración de carga solo es posible para energías mucho mayores a las que tienen los niveles que conforman la capa 1, pero a medida que se incrementa el radio del QD1 la energía correspondiente a este estado desciende y, cuando el tamaño de este punto casi alcanza el de los demás QDs del clúster, es cuando tiene lugar la interacción con el quinto nivel. A partir de $\rho > 1$ se observa cómo los cinco niveles más altos de la primera capa se mantienen casi invariantes, por el contrario, para el estado fundamental tiene lugar un descenso notable en su energía debido a que el QD1 presenta un tamaño cada vez mayor que los demás y el electrón buscará localizarse fuertemente en este punto.

En la Figura 13(c), se observa un comportamiento similar al anterior, con la diferencia de que las capas formadas por los cinco niveles energéticos están casi degeneradas debido a que el

acople es casi nulo en esta situación. En la Figura 13(d) se ha hecho un acercamiento que verifica la presencia de un anticruce, donde la simetría idéntica de los estados involucrados prohíbe el cruce en sus respectivos niveles de energía, pese a la interacción entre dichos estados. Justo después del anticruce, el estado que desciende desde la capa superior presenta una dependencia débil con el crecimiento del QD1, debido a su distribución de densidad de probabilidad, por lo que su energía permanece prácticamente constante. Como consecuencia, la estructura de capas se modifica y la primera capa pasa a estar conformada por seis niveles en lugar de cinco, como se mencionó previamente.

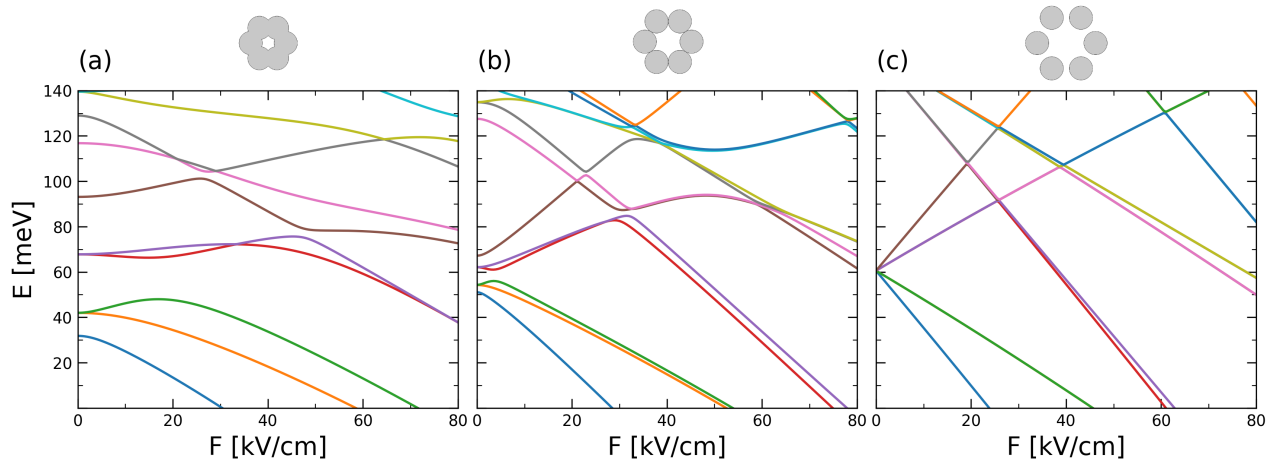
Por último, en la Figura 13(a) se observa un comportamiento menos marcado al de los casos anteriores, debido a que la estructura por capas casi desaparece para este régimen de fuerte acoplamiento entre QDs y, por lo tanto, el sistema se comporta más como una única estructura que como varias estructuras acopladas.

4.2 Efecto de Campo Eléctrico

En presencia de un campo eléctrico externo se espera que los niveles de energía tengan un desplazamiento, mientras que los doblemente degenerados se desdoblen. En la Figura 14 se muestra el espectro de energías en función de la intensidad del campo eléctrico externo F aplicado en dirección $+\hat{x}$, para un clúster hexagonal uniforme bajo condiciones de acoplamiento fuerte y débil, considerando incluso el caso de puntos remotos entre sí, es decir, desacoplados (acoplamiento nulo).

Figura 14

Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo eléctrico externo en el clúster hexagonal uniforme bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo



Los valores de energía sin campo eléctrico ($F = 0$) en la Figura 14 corresponden, respectivamente, a los obtenidos para $\gamma = 1.5, 2$ y 2.5 en el caso uniforme (Figura 7). En esta última figura se aprecia que el segundo ($k = 2, 3$) y tercer ($k = 3, 4$) nivel están doblemente degenerados. En el régimen de acoplamiento fuerte (a) cada uno de estos niveles se desdobra al incrementar la intensidad de campo eléctrico externo, mientras que en los demás regímenes (b) y (c) dicho desdoblamiento decrece a medida que se reduce el acoplamiento entre puntos cuánticos, volviéndose casi insignificante y desapareciendo, respectivamente. Esto permite verificar el efecto del grado de acoplamiento sobre el clúster hexagonal uniforme al aplicar un campo eléctrico externo.

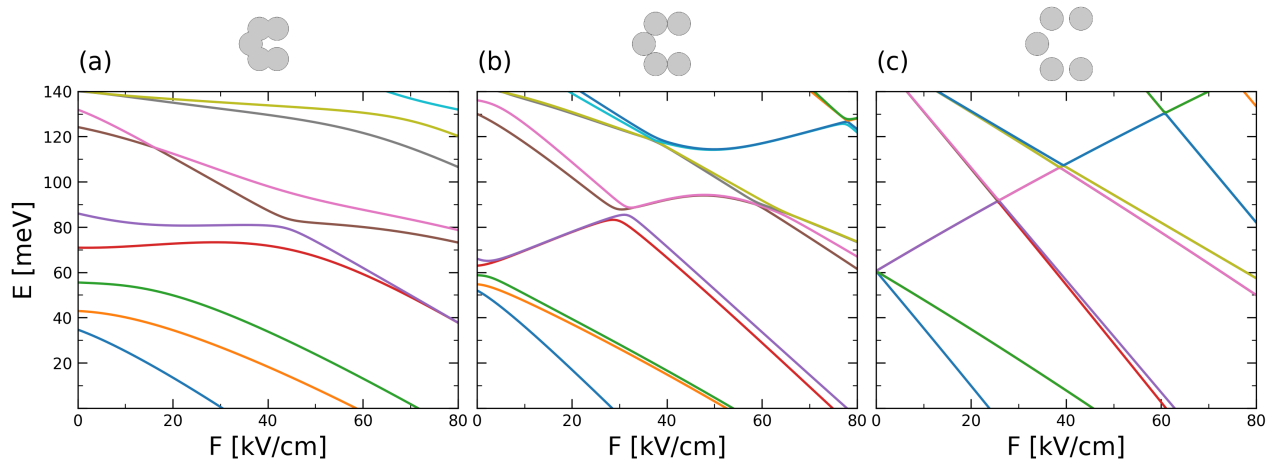
Adicionalmente, se observa que, para un mayor grado de acoplamiento, la dependencia de las curvas con la intensidad de campo eléctrico presenta el comportamiento característico del efecto Stark no lineal. A medida que este acoplamiento disminuye, dicha dependencia tiende progresivamente a un comportamiento aproximadamente lineal.

Ahora, en la Figura 15 se muestra el espectro de energías en función de la intensidad del

campo eléctrico externo para el caso de vacancia bajo condiciones de acoplamiento fuerte, débil y sin acople.

Figura 15

Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo eléctrico externo en el clúster hexagonal para el caso de vacancia bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo



Al igual que en el caso uniforme, los niveles en $F = 0$ se encuentran inicialmente separados y, a medida que disminuye el grado de acoplamiento, reducen su separación. En contraste con dicho caso, (i) los niveles que allí se encontraban degenerados aquí no lo están debido a la ruptura de simetría inducida por la vacancia, y (ii) la primera capa ya no presenta seis niveles, sino cinco.

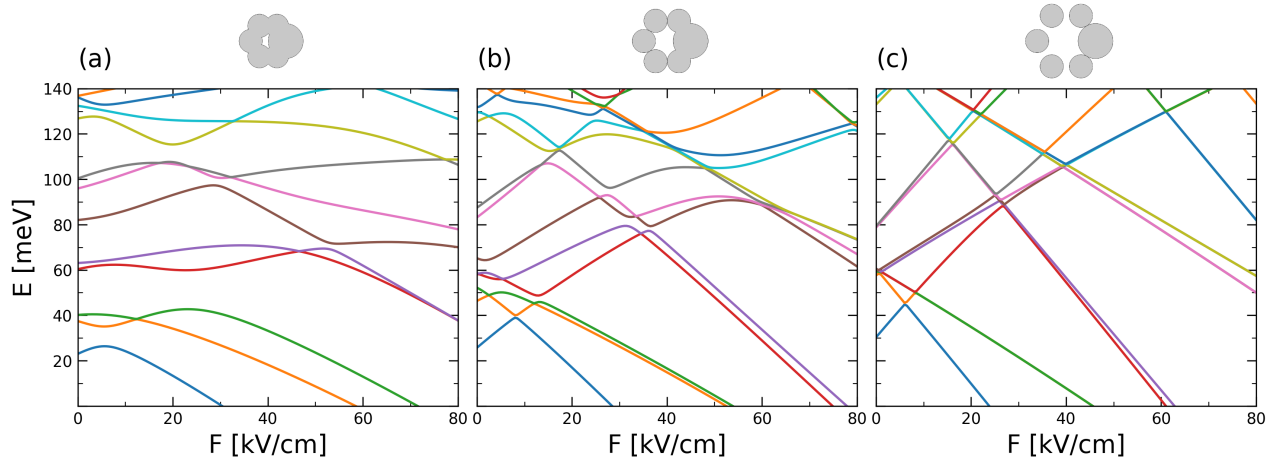
En relación con (i), al no haber degeneración, el campo eléctrico se manifiesta sobre los estados como un corrimiento de sus energías, el cual depende de su simetría con respecto a la dirección en la que se aplica dicho campo. Por otra parte, en relación con (ii), la ausencia de uno de los niveles modifica la estructura de cruces y anticruces del espectro, de modo que algunos de los presentes en el caso uniforme dejen de observarse, lo que puede atribuirse directamente a la

falta del estado asociado al punto cuántico ausente.

Por último, se considera el caso de impureza, cuyo espectro de energías en función de la intensidad del campo eléctrico se muestra en la Figura 16.

Figura 16

Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo eléctrico externo en el clúster hexagonal para el caso de impureza bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo



Los valores de energía allí calculados para $F = 0$ corresponden, respectivamente, a los obtenidos para $\gamma = 1.5$, 2 y 2.5 en el caso de impureza al analizar el efecto del grado de acoplamiento (Figura 12). En dicho análisis se mencionó que la estructura de capas del espectro de energías tiene una ligera deformación en el régimen sin acoplamiento. En particular, para $\gamma = 2.5$ los niveles de energía no tienden a un mismo valor, estando el valor de energía del estado base por debajo de los demás niveles de la primera capa. Por lo tanto, la Figura 16(c) es consistente con lo allí mostrado.

En los casos anteriores, la dependencia de las energías con la intensidad de campo eléctrico mostraba el comportamiento característico del efecto Stark no lineal en el régimen de acopla-

miento fuerte, tendiendo a una dependencia aproximadamente lineal al disminuir el acoplamiento. En el caso de impureza, este comportamiento general se conserva, a excepción de un ligero cambio en el régimen sin acoplamiento.

En particular, para el régimen de acoplamiento fuerte (a), el espectro de energías es más irregular en comparación, lo que refleja la pérdida de simetría. Por otra parte, para el régimen sin acoplamiento (c), no presenta en todo su espectro una dependencia lineal.

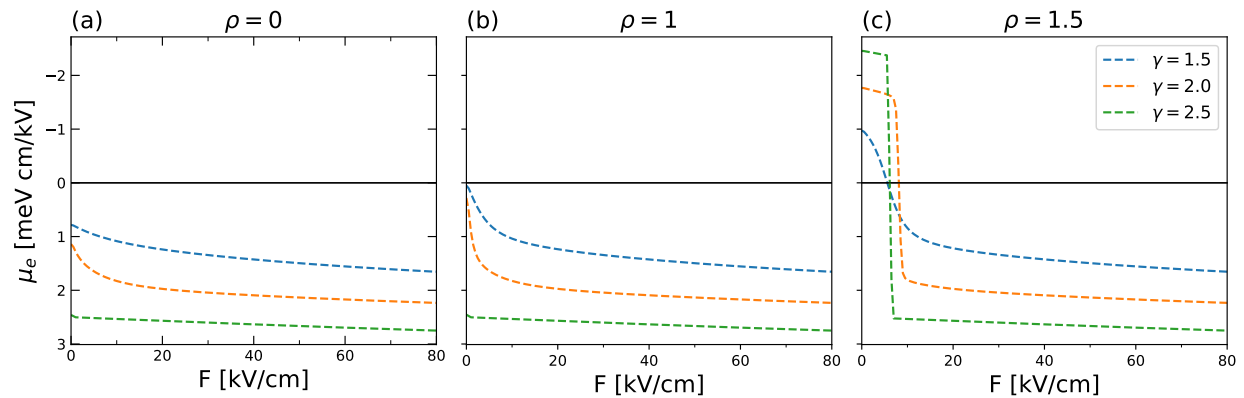
Un rasgo interesante es el comportamiento del estado base, cuya energía aumenta inicialmente con la intensidad de campo eléctrico y posteriormente disminuye a partir de un valor de aproximadamente 5 [kV/cm], independientemente del régimen de acoplamiento. Este comportamiento sugiere una competencia entre el confinamiento estructural y el eléctrico: el primero impone la localización del electrón en el QD1, mientras que el segundo favorece su desplazamiento hacia el QD opuesto a la dirección del campo.

Como observación general del efecto de un campo eléctrico externo, la dependencia de las energías con el campo, en general, no cambia con el desorden estructural, sino con el grado de acoplamiento.

Resulta de interés analizar el momento dipolar inducido por el campo eléctrico externo a partir de la energía del estado base a $T = 0$ K, por lo cual no se requiere considerar un tratamiento estadístico asociado a la ocupación de estados excitados. Para ello, se calcula dicho momento a partir de la variación de la energía con respecto a la intensidad de campo eléctrico, definido como:

$$\mu_e = -\frac{\partial E}{\partial F}. \quad (5)$$

En la Figura 17 se muestra el momento dipolar inducido en función de la intensidad del campo eléctrico F .

Figura 17*Momento dipolar inducido en función del campo eléctrico*

Nota. (a) corresponde al caso de vacancia, (b) al caso uniforme y (c) al caso de impureza. En todos los casos, los colores representan el grado de acoplamiento: fuerte (azul), débil (naranja) y nulo (verde).

El momento dipolar inducido está directamente relacionado con la redistribución espacial de la densidad electrónica, es decir, con la polarización del estado. En los casos de vacancia (a) y uniforme (b), μ_e varía de forma suave, ya que, en ausencia de campo eléctrico, la distribución electrónica inicial no requiere una redistribución significativa. En cambio, en el caso de impureza (c) se observa un cambio abrupto entre aproximadamente 5 y 10 [kV/cm], relacionada a la densidad electrónica al aplicar un campo eléctrico externo.

Al ser inducidos valores elevados del momento dipolar, es posible influir de manera significativa en las propiedades ópticas del sistema. Adicionalmente, se observa que, al aplicar un campo eléctrico en el caso de impureza, el sistema tiende a presentar un comportamiento similar al del caso de vacancia en ausencia de campo, lo cual sugiere que el campo externo puede compensar parcialmente el efecto de la asimetría estructural.

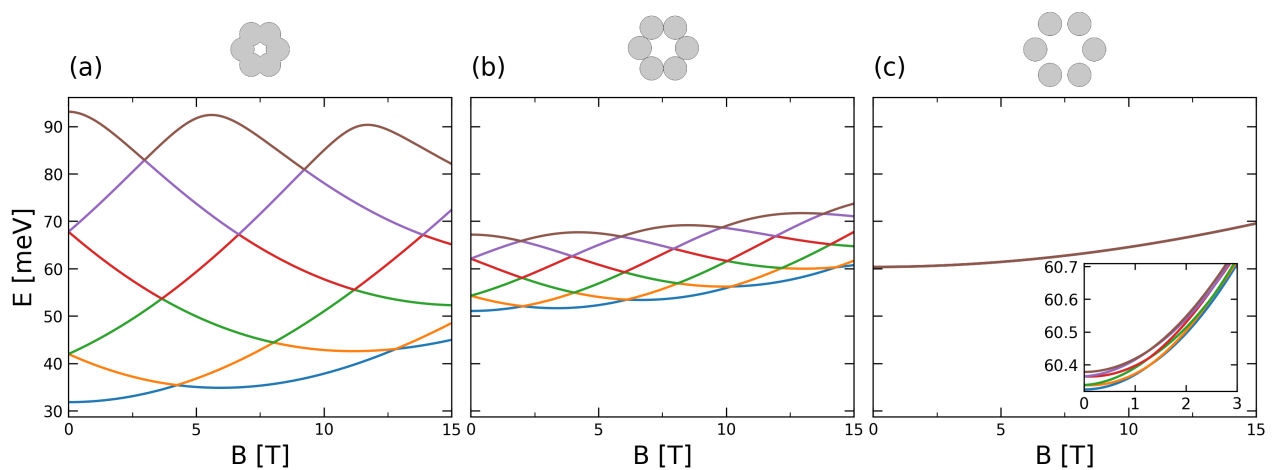
4.3 Efecto de Campo Magnético

Esta sección tiene como objetivo estudiar el efecto de un campo magnético externo aplicado en dirección perpendicular al plano del clúster cíclico sobre el espectro de energías del sistema. Por ello, se presentan a continuación los cálculos realizados para los distintos casos de desorden estructural bajo condiciones de acoplamiento fuerte y débil, considerando incluso el caso de puntos remotos entre sí, es decir, desacoplados.

En la Figura 18 se presenta el espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo magnético externo para el caso uniforme bajo condiciones de acoplamiento fuerte, débil y nulo.

Figura 18

Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo magnético externo en el clúster hexagonal uniforme bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo



Allí se observan múltiples cruces entre los seis niveles de la primera capa, independientemente del régimen de acoplamiento. Aunque en el régimen sin acoplamiento (c) los niveles

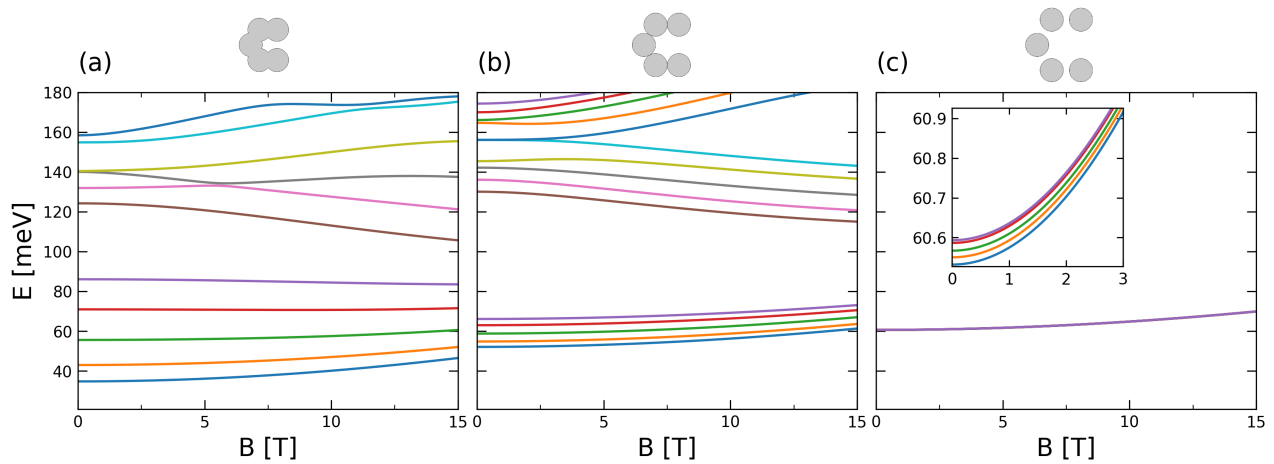
parecen permanecer prácticamente degenerados, un acercamiento en la región $0 \leq B \leq 3T$ revela que los niveles degenerados se desdoblan y que se siguen presentando cruces entre los niveles.

Estos cruces indican la existencia de oscilaciones de Aharonov-Bohm en el espectro de energías, lo cual evidencia que el clúster cíclico de seis puntos cuánticos muestra un comportamiento análogo al de un anillo cuántico. Un aspecto relevante es que la amplitud de estas oscilaciones disminuye conforme se reduce el acoplamiento entre puntos: pasa de aproximadamente 60 meV en el régimen de acoplamiento fuerte a cerca de 20 meV en el débil y, finalmente a fracciones de meV en el caso desacoplado. Este comportamiento se asocia a que el electrón pasa de un régimen en el que se encuentra deslocalizado (análogo a un anillo cuántico) a uno donde queda progresivamente localizado en cada punto cuántico, dependiendo cada vez más del tunelamiento para el acoplamiento entre puntos adyacentes.

En la Figura 19 se presenta el espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo magnético externo para el caso de vacancia bajo condiciones de fuerte, débil y no acoplamiento.

Figura 19

Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo magnético externo en el clúster hexagonal para el caso de vacancia bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo

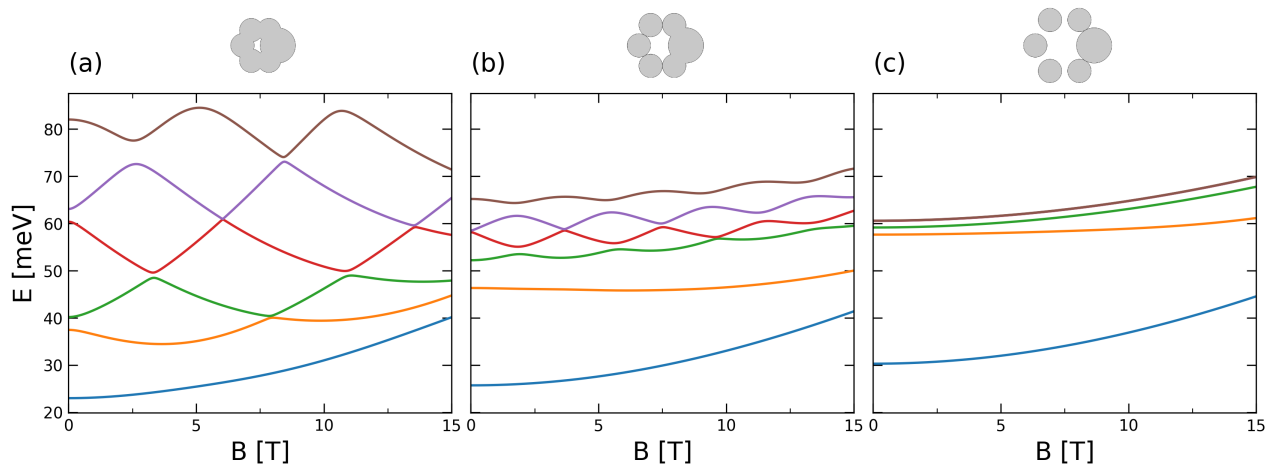


Dado que la vacancia, además de romper la simetría, rompe la estructura cíclica del clúster o, en otras palabras, la estructura pasa de ser doblemente conexa (como un anillo) a simplemente conexa. En consecuencia, no se observan oscilaciones de Aharonov-Bohm como en el caso uniforme. Se observa, sin embargo, un comportamiento interesante en el espectro de la Figura 18(b): los niveles de la primera capa se mantienen aproximadamente equidistantes y aumentan con la intensidad del campo magnético. Por otro lado, la segunda capa, conformada por diez niveles, parece “desdoblarse” en paquetes de cinco al aumentar B . Esto es muy interesante porque muestra un comportamiento de QD, pero cinco veces degenerado.

Finalmente, en la Figura 20 se presenta el espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo magnético externo para el caso de impureza bajo condiciones de fuerte, débil y no acoplamiento.

Figura 20

Espectro de bajas energías en función de la intensidad del campo magnético externo en el clúster hexagonal para el caso de impureza bajo condiciones de acoplamiento (a) fuerte, (b) débil y (c) nulo



Dado que el QD1 posee un mayor tamaño que los demás, el clúster conserva su estructura cíclica, lo que da lugar a un comportamiento mixto entre oscilaciones de Aharonov-Bohm y un comportamiento de un punto cuántico individual. En particular, las oscilaciones de Aharonov-Bohm se manifiestan en los estados excitados, mientras que el estado base presenta un comportamiento más similar al de un único QD debido a ser el QD1 más grande que los demás. En el régimen sin acoplamiento (c), este último comportamiento domina completamente. Adicionalmente, en el régimen de acoplamiento fuerte (a) no se observan únicamente cruces, sino también anticruces, pues la existencia del QD impureza produce una ruptura en la simetría e induce una mayor localización electrónica en él..

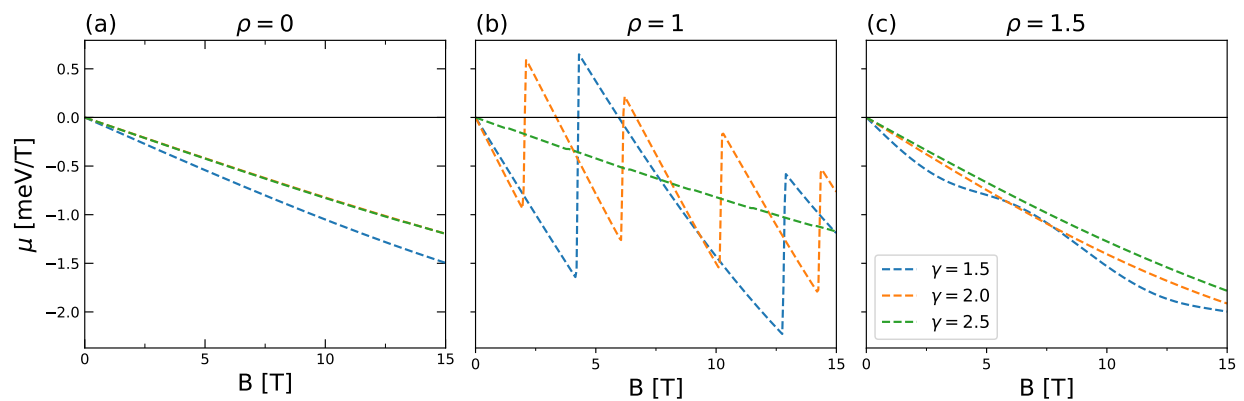
Resulta de interés también analizar el momento dipolar magnético debido al campo eléctrico externo a partir de la energía del estado base. Para ello, se calcula dicho momento a partir de la variación de la energía con respecto a la intensidad del campo magnético, definido como:

$$\mu = -\frac{\partial E}{\partial B}. \quad (6)$$

En la Figura 21 se muestra el momento dipolar magnético en función de la intensidad del campo magnético.

Figura 21

Momento dipolar magnético en función de la intensidad del campo magnético



Nota. (a) corresponde al caso de vacancia, (b) al caso uniforme y (c) al caso de impureza. En todos los casos, los colores representan el grado de acoplamiento: fuerte (azul), débil (naranja) y nulo (verde).

En el caso uniforme (b), el comportamiento del momento dipolar magnético es consistente con lo observado previamente en el espectro de energías. La amplitud de las oscilaciones de Aharonov-Bohm disminuye y el periodo de estas en función del campo magnético aumenta a medida que el grado de acoplamiento entre puntos es menor. En cambio, para los casos de desorden (vacancia e impureza) (a) y (c) se muestra un comportamiento de μ prácticamente lineal, similar al caso de puntos cuánticos.

Conclusiones

El uso del *software* COMSOL Multiphysics demostró ser una herramienta eficaz para el estudio del sistema considerado, al permitir obtener resultados consistentes y físicamente interpretables mediante el método de elementos finitos.

Nuestros resultados demuestran que la no uniformidad en el tamaño de los QDs que conforman clústeres cíclicos hexagonales puede alterar de manera significativa las propiedades espectrales del sistema, con efectos que dependen de forma crítica del grado de acoplamiento entre los QDs. Esto pone de manifiesto la alta sensibilidad de estos sistemas a variaciones estructurales y resalta la importancia de un control preciso de sus parámetros geométricos y de interacción. Además, su presencia favorece la localización de los estados electrónicos.

El grado de acoplamiento entre los puntos cuánticos del clúster influye de manera significativa en el espectro de bajas energías. En el régimen sin acoplamiento, los niveles de energía tienden a agruparse, por lo cual tener una separación energética notablemente baja. Por el contrario, al aumentar el acoplamiento incrementa la separación energética.

Nuestros resultados muestran que la aplicación de un campo eléctrico externo a clústeres cíclicos hexagonales de QDs induce cambios más significativos en la estructura del espectro energético y genera momentos dipolares más intensos en sistemas con alto grado de desorden estructural, particularmente para el caso donde se tiene un QD impureza. Por otro lado, un campo eléctrico externo puede compensar los efectos del desorden estructural y promover la restauración de simetrías rotas en el clúster.

Adicionalmente, la presencia de un campo magnético externo en el caso uniforme da lugar a oscilaciones de Aharonov-Bohm, análogas a las observadas en anillos cuánticos. Este resultado

indica que, pese al sistema considerado no tratarse de un anillo cuántico, sino de un clúster cíclico conformado por seis puntos cuánticos, su comportamiento reproduce el de un sistema anular.

Además, la presencia de desorden estructural, ya sea por una vacancia o por la incorporación de una impureza de punto cuántico, conduce a la atenuación e incluso a la desaparición de las oscilaciones de Aharonov–Bohm. Asimismo, se observó que, bajo condiciones de acoplamiento débil, la amplitud de estas oscilaciones disminuye progresivamente hasta anularse.

Referencias Bibliográficas

- Adhikary, S., & Chakrabarti, S. (2018). *Quaternary Capped In(Ga)As/GaAs Quantum Dot Infrared Photodetectors: From Materials to Devices* (1.^a ed.). Springer. <https://doi.org/10.1007/978-981-10-5290-3>
- Ashcroft, N. W., & Mermin, N. D. (1976). *Solid state physics*. Holt, Rinehart & Winston.
- Binns, C. (2010). *Introduction to Nanoscience and Nanotechnology*. John Wiley & Sons.
- Cao, G. (2004). *Nanostructures and Nanomaterials: Synthesis, Properties and Applications*. World Scientific. <https://doi.org/10.1142/p305>
- Chutia, S., Friesen, M., & Joynt, R. (2006). Detection and measurement of the Dzyaloshinskii–Moriya interaction in double quantum dot systems. *Physical Review B*, 73(24), 241304. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.73.241304>
- COMSOL. (2026). *COMSOL Multiphysics® Simulation Software* [Consultado el 14 de febrero de 2026]. <https://www.comsol.com/comsol-multiphysics>
- Corredor, C. T. (2014). *Estados moleculares de puntos cuánticos acoplados lateralmente bajo un campo eléctrico* [Tesis de pregrado]. Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.
- Cuadra, L., & Nieto-Borge, J. C. (2021). Approaching disordered quantum dot systems by complex networks with spatial and physical-based constraints. *Nanomaterials*, 11(8), 2056. <https://doi.org/10.3390/nano11082056>
- Fang, J., Zhou, Z., Xiao, M., Lou, Z., Wei, Z., & Shen, G. (2020). Recent advances in low-dimensional semiconductor nanomaterials and their applications in high-performance photodetectors. *InfoMat*, 2(2), 291-317. <https://doi.org/10.1002/inf2.12067>

- Frei, W. (2013, 4 de noviembre). *Meshing Your Geometry: When to Use the Various Element Types* [Consultado el 14 de febrero de 2026]. COMSOL Blog. <https://www.comsol.com/blogs/meshing-your-geometry-various-element-types/>
- Geller, M. R. (2001). *Quantum phenomena in low-dimensional systems*. arXiv: [cond-mat/0106256](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0106256). <https://arxiv.org/abs/cond-mat/0106256>
- Gélvez, A. L. (2019). *Propiedades electrónicas de moléculas artificiales de tres puntos cuánticos acoplados lateralmente* [Tesis de maestría]. Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia.
- Ginés, L. (2022). *Crecimiento por MBE de nanoestructuras semiconductoras III–V para tecnologías de información cuánticas* [Proyecto fin de máster]. Universidad Complutense de Madrid, Madrid, España. <https://docta.ucm.es/bitstreams/04b34e23-d57d-4df3-bfea-fc7d48f6aa84/download>
- Gutiérrez Niño, W., García Russi, L. F., Mikhailov, I. D., & Sierra Ortega, J. (2025). Impact of the packing factor variation on electro-optical properties of quantum dot clusters. *Physica B: Condensed Matter*, 699.
- Harrison, P., & Valavanis, A. (2016). *Quantum wells, wires and dots: Theoretical and computational physics of semiconductor nanostructures* (4.^a ed.). Wiley.
- Jevasuwan, W., Panyakeow, S., & Ratanathamphan, S. (2007). In-droplet-induced formation of InP nanostructures by solid-source molecular-beam epitaxy. *Microelectronic Engineering*, 84, 1458-1461. <https://doi.org/10.1016/j.mee.2007.01.014>
- Ledentsov, N. N., Grundmann, M., Heinrichsdorff, F., Bimberg, D., Ustinov, V. M., Zhukov, A. E., Maximov, M. V., Alferov, Z. I., & Lott, J. A. (2000). Quantum-dot heterostructure lasers. *IEEE Journal of Selected Topics in Quantum Electronics*, 6(3), 439-451. <https://doi.org/10.1109/2944.865099>

- Lee, H., Wang, Z. M., Strom, N. W., Mazur, Y. I., & Salamo, G. J. (2006). InGaAs quantum dot molecules around self-assembled GaAs nanomound templates. *Applied Physics Letters*, *89*(20), 202101.
- Naranjo Rendón, J. P. (2025). *Theoretical study of the electronic, optical, and thermodynamic properties of a molecular system formed by a circular chain of semiconductor quantum dots* [Tesis de maestría]. Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia.
- Panyakeow, S. (2010). Quadra-quantum dots and related patterns of quantum dot molecules: Basic nanostructures for quantum dot cellular automata application. *Engineering Journal*, *14*(4), 41-48. <https://doi.org/10.4186/ej.2010.14.4.41>
- Valizadeh, A., Mikaeili, H., Samiei, M., Farkhani, S. M., Zarghami, N., Kouhi, M., Akbarzadeh, A., & Davaran, S. (2012). Quantum dots: synthesis, bioapplications, and toxicity. *Nanoscale Research Letters*, *7*(1), 480. <https://doi.org/10.1186/1556-276X-7-480>
- Vurgaftman, I., Meyer, J. R., & Ram-Mohan, L. R. (2001). Band parameters for III–V compound semiconductors and their alloys. *Journal of Applied Physics*, *89*(11), 5815-5875. <https://doi.org/10.1063/1.1368156>