

Propiedades electrónicas de moléculas artificiales de tres puntos cuánticos acoplados
lateralmente

Adriana Lucía Gélvez Cortés

Trabajo de investigación presentado como requisito para optar al título de Magíster en Física

Director

Willian Gutierrez Niño

Doctor en Ciencias Naturales-Física

Universidad Industrial de Santander

Facultad de Ciencias

Escuela de Física

Maestría en Física

Bucaramanga

2019

Dedicatoria

”Es posible que no lo diga muy a menudo, pero en verdad estoy agradecida con mi familia y amigos. El tiempo que pasamos juntos es muy especial, nunca podría remplazar a ninguno de ellos. Prometo que jamás olvidaré a mis seres queridos, que ríen conmigo, que me soportan y me hacen continuar”. Es a todos ellos a quienes dedico mi trabajo.

Agradecimientos

A mi director, el profesor Willian Gutierrez, por toda su ayuda a lo largo de estos años.

A mis padres y mi nona Victoria, por todo el apoyo y el cariño que me dan día a día; a mis tías, tíos y primos, por la confianza, especialmente mi tía Lucy, quien no pudo estar al final de este proceso, pero que siempre confió en que podría terminarlo; y a el "refugio animal" que habita en mi casa, por alegrarme todos los días.

A mi hermano Sergio por revisar la redacción de algunas partes del documento, ayudarme cuando estaba confundida con el script para ordenar datos, y sobretodo por hacer con "sus métodos" que yo crea más en mi misma.

A mis compañeros de maestría, a mis amigos de la escuela y mis compañeros de trabajo del Socorro, por compartir conmigo ideas y buenos ratos. Especialmente agradezco: a Sandra y a Mario, por todos los ratos compartidos, los chistes y los consejos; Fabian, Daniel, Fernando y Jose, por las clases compartidas; a Wanda, por contestar mis inquietudes sobre python y ayudarme con el script; y a Julian, por poner atención a mis preguntas y aportarme ideas.

A la Vicerrectoría de Investigación y Extensión de la Universidad Industrial de Santander y a Colciencias, porque a través de la convocatoria 706 "JOVENES INVESTIGADORES E INNOVADORES 2015", financiaron parte de mis estudios.

Al sistema educativo colombiano por permitirme estudiar una maestría de investigación usando recursos públicos.

Tabla de Contenido

Introducción	14
1. Marco teórico y estado del arte	17
1.1. Orbitales moleculares	17
1.2. Fabricación de puntos cuánticos acoplados lateralmente	20
1.3. Estudios teóricos sobre puntos cuánticos acoplados	22
2. Modelado matemático y simulación	25
2.1. Modelo estructural	25
2.2. Ecuación de Schrödinger	26
2.3. Método de solución	27
3. Análisis de resultados	30
3.1. Molécula triangular	30
3.1.1. Efecto de campo magnético	34
3.1.2. Efecto de campo eléctrico	38
3.1.3. Efecto simultáneo de campos magnético y eléctrico	40
3.2. Molécula lineal	41
3.2.1. Efecto de campo eléctrico	43
3.2.2. Efecto de campo magnético	46
3.2.3. Efecto simultáneo de campos magnético y eléctrico	47
3.3. Transformación topológica	48
4. Conclusiones	54
Referencias Bibliográficas	54

Lista de Figuras

1.	Curvas de energía potencial del H_2^+ . Tomada de [Atkins and Friedman, 2011] . . .	18
2.	(a) Energías relativas de orbitales moleculares y sus orbitales atómicos constituyentes. (b) Combinación de orbitales atómicos 1s para formar orbitales moleculares	19
3.	(a) Ilustración del régimen de crecimiento pseudomórfico. (b) Posterior formación de nano-islas durante el modo de crecimiento Stransky-Krastanov.	21
4.	Ilustración esquemática del proceso para fabricar moléculas de dos QDs acoplados lateralmente de InGaAs, (a) Puntos cuánticos de InAs sobre un sustrato de GaAs, (b) recubrimiento de los QD con 10 nm de GaAs, (c) nano-hueco producido por grabado in situ con $AsBr_3$, (d) formación de QDM alrededor del hueco debido al rellenado de los nanoagujeros con InGaAs diluido.	22
5.	Imágenes de AFM de estructuras multimoleculares fabricadas por deposición de diferentes cantidades de InAs sobre nano-huecos a diferentes temperaturas del sustrato. (a) 2.5 ML a 500 °C, (b) 1.8 ML InAs a 470 °C, (c) 2.0 ML InAs a 470 °C y (d) 1.8 ML InAs a 450 °C. Figura tomada de [Schmidt, 2007]	23
6.	Esquema de la vista superior del sistema de tres puntos cuánticos acoplados lateralmente. a) Configuración triangular b) Configuración lineal	25
8.	Comparación de la gráfica de los primeros niveles energeticos en función de la variable β . a) Obtenida por Lent [Lent, 1991]. b) Calculados con el modelo realizado en COMSOL Multiphysics [®]	29
9.	Niveles de energía más bajos como función de la distancia entre los centros de los QDs para la TTQDM, sin campos externos.	31

10. Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración triangular, sin campos externos. 32
11. Niveles de energía más bajos como función del campo magnético externo, sin campo eléctrico y una distancia entre puntos de: a) $0nm$ b) $75nm$ 35
12. Niveles de energía más bajos como función del campo magnético externo, sin campo eléctrico y una distancia entre puntos de: a) $87nm$ b) $95nm$ 36
13. Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración triangular, en presencia de campo magnético, sin campo eléctrico y una distancia entre puntos de $95nm$ 37
14. Niveles de energía más bajos como función de la distancia entre los centros de los QDs para la TTQDM, sin campo eléctrico y campo magnético de: a) $2T$ b) $5T$ 37
15. Niveles de energía más bajos como función del campo eléctrico externo para la TTQDM, sin campo magnético y una distancia entre puntos de $75nm$ 38
16. Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración triangular, en presencia de campo eléctrico, sin campo magnético y una distancia entre puntos de $75nm$ 39
17. Niveles de energía más bajos como función del campo eléctrico externo para la TTQDM, sin campo magnético y una distancia entre puntos de $95nm$ 40
18. Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración triangular, en presencia de campo eléctrico, sin campo magnético y una distancia entre puntos de $95nm$ 40
19. Niveles de energía más bajos como función del campo magnético externo, en presencia de un campo eléctrico externo de $400V/cm$. a) $d = 75nm$ b) $d = 95nm$. . . 41
20. Niveles de energía más bajos como función de la distancia entre los centros de los QDs para la LTQDM, sin campos externos. 42
21. Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración lineal, sin campos externos. 43

22. Niveles de energía más bajos como función del campo eléctrico externo para la LTQDM, sin campo magnético y una distancia entre puntos de $75nm$ 44
23. Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración lineal, en presencia de diferentes campos eléctricos, sin campo magnético externo y una distancia fija entre puntos de $75nm$ 45
24. Niveles de energía más bajos como función del campo eléctrico externo para la LTQDM, sin campo magnético y una distancia entre puntos de $95nm$ 45
25. Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración lineal, en presencia de diferentes campos eléctricos, sin campo magnético externo y una distancia fija entre puntos de $95nm$ 46
26. Niveles de energía más bajos como función del campo magnético externo para la LTQDM, sin campo eléctrico y una distancia entre puntos de $95nm$ 46
27. Niveles de energía más bajos como función del campo eléctrico externo para la LTQDM, con campo magnético de $2T$ y una distancia entre puntos de: a) $75nm$ b) $95nm$ 47
28. Niveles de energía más bajos como función del campo magnético externo para la LTQDM, con campo eléctrico externo de $400V/cm$ y una distancia entre puntos de $95nm$ 48
29. Niveles de energía más bajos como función del parámetro de forma variable h , distancia entre los centros de los QDs de $75nm$ y diferentes campos externos. . . . 49
30. Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos sometida a una transformación topológica desde una configuración lineal a una triangular, con una distancia entre los centros de los QDs de $75nm$. . . 50
31. Niveles de energía más bajos como función del parámetro de forma variable h , distancia entre los centros de los QDs de $95nm$ y diferentes campos externos. . . . 51

32. Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos sometida a una transformación topológica desde una configuración lineal a una triangular, con una distancia entre los centros de los QDs de $95nm$. . . 52

Lista de Tablas

1. Parámetros de los materiales, extraídos de [Levinshtein et al., 1996] 26
2. Resultados del estado base de un QD circular, realizando un refinamiento de malla para elementos Lagrangianos de segundo y tercer orden 28

Resumen

TÍTULO: PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DE MOLÉCULAS ARTIFICIALES DE TRES PUNTOS CUÁNTICOS ACOPLADOS LATERALMENTE*

AUTOR: ADRIANA LUCÍA GÉLVEZ CORTÉS**

PALABRAS CLAVE: puntos cuánticos acoplados, estados moleculares, espectro de energía, oscilaciones Aharonov–Bohm, molécula triangular, molécula de puntos cuánticos.

DESCRIPCIÓN:

Se estudian teóricamente los estados energéticos de una nanoestructura bidimensional constituida por tres puntos cuánticos idénticos acoplados lateralmente, con un único electrón de conducción confinado en su interior, bajo campos eléctricos y/o magnéticos externos. Se consideraron dos modelos estructurales para los tres puntos cuánticos: uno triangular, en el cual los centros de los tres puntos se encontraban en los vértices de un triángulo equilátero y presentaba simetría C_3 ; otro lineal, en el cual los centros eran colineales con simetría C_2 . Se realizó también una transformación topológica del sistema, desde la configuración lineal a la triangular. Se estudió el acople cuántico lateral variando la distancia entre los puntos, en las dos configuraciones planteadas. Este acople entre los puntos permitió la formación de estados moleculares, con carácter enlazante y anti-enlazante, como sucede en las moléculas naturales. En el caso triangular, se encontró que dependiendo de la separación entre puntos, el sistema exhibe una transición drástica en sus propiedades espectrales, porque el incremento de la separación transforma la estructura de simplemente conexa a una cadena de puntos cuánticos en forma de anillo. Además, para este caso los resultados muestran que la aplicación de un campo magnético orientado en la dirección de crecimiento da lugar a oscilaciones de tipo Aharonov-Bohm en la energía y, por lo tanto, favorece la aparición de corrientes entre los tres puntos, las cuales desaparecen si se aplica simultáneamente un campo eléctrico. En el caso lineal, el campo magnético no genera oscilaciones en la energía, y se encontró que el efecto del campo eléctrico es más fuerte, generando un número mayor de cruces y anticruces entre niveles.

*Trabajo de Investigación

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

Abstract

TITLE: ELECTRONIC PROPERTIES OF Laterally Coupled Three-Quantum-Dot Artificial Molecules *

AUTHOR: ADRIANA LUCÍA GÉLVEZ CORTÉS **

KEYWORDS: laterally coupled quantum dots, molecular states, energy spectrum, Aharonov–Bohm oscillation, triangular molecule, quantum dot molecule.

DESCRIPTION:

We study theoretically the energy states of a two-dimensional nanostructure consisting of three identical laterally coupled self-assembled quantum dots, with a single conduction electron confined in its interior, under external electric and/or magnetic fields. Two structural models were considered for the three quantum dots: a triangular one, in which the centers of the three dots were at the vertices of an equilateral triangle and had C3 symmetry; and a linear one, in which the centers were colinear with C2 symmetry; and also we made a structural transformation of the system, from the linear to the triangular configuration. The lateral quantum coupling between dots is studied by changing of inter-dot distance, while maintaining triangular and linear configurations, and it shows that this coupling between them allows the formation of molecular-like states that show bonding and antibonding character, as in atomic molecular bonds. For the triangular configuration, we found that depending on the separation between dots, the system exhibits a drastic transition in its spectral properties, because the increase in the distance between dots transforms the simply connected molecular structure into a ring shaped quantum dot molecular structure. In addition, for this case our results show that the application of a magnetic field oriented in the direction of growth gives rise to type Aharonov-Bohm oscillations in energy and therefore it favors the appearance of currents between the three dots, which disappear if an electric field is applied simultaneously. In the linear case, the magnetic field does not generate oscillations in the energy, and it was found that the effect of the electric field is stronger, generating a greater number of crosses and anticrosses between levels.

* Master's degree research work

** Faculty of Science. School of Physics. Advisor: Willian Gutierrez Niño, Ph.D in Natural Sciences-Physics

Introducción

En las últimas décadas se ha dado la posibilidad de manipular la materia en la escala nanométrica y se ha obtenido como fruto el surgimiento de una nuevas disciplinas conocidas como nanociencia y nanotecnología, en las que se reúnen investigadores de diferentes campos de la ciencia y la ingeniería con el fin de comprender y a la vez manipular y diseñar las propiedades físicas que tendrán los nuevos materiales creados mediante nanoestructuración. Dentro de estas propiedades se pueden incluir el comportamiento eléctrico, óptico, estructural y térmico [Sattler, 2010]. Se espera que este tipo de investigación revolucione distintas áreas de la ciencia y de solución a algunos de los distintos problemas que enfrenta la sociedad en la actualidad, puesto que se prevén numerosas aplicaciones para la medicina, la construcción, las tecnologías de la información, la alimentación y el medio ambiente [Salamanca-Buentello et al., 2005].

La física de los semiconductores, que comenzó a desarrollarse en la segunda mitad del siglo XX, ha contribuido en gran parte al desarrollo de la civilización y la cultura modernas. La realización del transistor en 1947 fue el inicio de un progreso tecnológico acelerado que llevó a la formación de la industria optoelectrónica actual. Sin embargo, a pesar de que las técnicas de miniaturización con las que se fabrican los diversos dispositivos utilizados en óptica y electrónica tienen como límite fundamental el tamaño atómico, los más recientes avances en técnicas de fabricación de semiconductores ha permitido llegar hasta los dominios del mundo nanoscópico. Como ejemplos de esto se tiene que en un futuro muy próximo los actuales transistores podrían reemplazarse por estructuras nanométricas que funcionen con un solo electrón y los cables de cobre por nanotubos de carbono [Dupas and Lahmani, 2007].

Dentro de los candidatos más opcionados que se pueden emplear para innovar en la fabricación de dispositivos semiconductores se encuentran los sistemas de baja dimensionalidad (LDS, del inglés low dimensional systems). Estas estructuras aprovechan el hecho de que a medida que se reduce continuamente alguna o algunas de sus dimensiones hasta el rango de las longitudes de las ondas de materia de Broglie, el comportamiento de sus propiedades físicas cambia notablemente, dado que empiezan a tener lugar efectos puramente mecánico cuánticos. La idea de emplear películas delgadas para estudiar los efectos de la cuantización estructural era muy popular a finales de la década de 1950 y principios de los años 60s [Lutsikii, 1970], pero fue el desarrollo, en los años posteriores, de las técnicas novedosas de crecimiento por deposición epitaxial, como epitaxia de haces moleculares (MBE, del inglés molecular beam epitaxy) y deposición química metalorgánica de vapor (MOCVD, del inglés metal organic chemical vapor deposition), lo que permitió la creación experimental de estructuras electrónicas bidimensionales, llamados pozos cuánticos (QWs, del inglés quantum wells). En 1969-70 Esaki y Tsu [Esaki and Tsu, 1970] propusieron el uso de heteroestructuras semiconductoras con multicapas periódicas, que denominaron superredes, para la creación de materiales artificiales. Pero en la década de los ochenta el interés de la investigación se trasladó a la fabricación y comprensión de estructuras con dimensionalidad aún más reducida, particularmente las precisas técnicas litográficas hicieron posible el confinamiento de los electrones en estructuras

cuasi-unidimensionales, que fueron denominadas hilos cuánticos (QWW, del inglés quantum well wire) [Petroff et al., 1982]. El caso extremo en el que se reducen las tres dimensiones de un cristal semiconductor a tamaños nanométricos recibe el nombre de punto cuántico (QD, del inglés quantum dots) [Bimberg et al., 1999].

Los QDs exhiben una cuantización completa de sus propiedades electrónicas, debido al fuerte confinamiento estructural impuesto sobre sus tres grados de libertad. Estos sistemas cerodimensionales pueden ser fabricados por diferentes métodos, destacándose los autoensamblados, ya sea por síntesis química (puntos cuánticos coloidales) o crecimiento epitaxial, usando el modo de crecimiento Stranski-Krastanov [Henini, 2011]. La investigación en este tipo de estructuras es extensa, principalmente por sus prometedoras aplicaciones en los campos de la optoelectrónica, biomedicina, e información y computación cuántica. La mayoría de las aplicaciones que se han propuesto y demostrado hasta el momento se basan en puntos cuánticos individuales o sistemas en los que cada QD puede considerarse como una entidad separada, como ejemplo se tienen: diodos emisores de luz basados en puntos cuánticos [Tessler et al., 2002], láseres [Klimov et al., 2000] y emisores de fotones individuales [Michler et al., 2000].

Cuando la separación entre un par o más puntos cuánticos individuales es del orden de la longitud de onda de De Broglie de los portadores de carga atrapados en su interior, entonces tiene lugar un acople cuántico entre estos y se observan funciones de onda similares a las exhibidas por las moléculas, por lo que a este tipo de sistemas se les denomina “moléculas artificiales” o moléculas de puntos cuánticos (QDM, del inglés quantum dot molecule). Es posible obtener distintas clases de moléculas artificiales de acuerdo a la orientación y al número de puntos cuánticos constituyentes. Un primer caso son los puntos cuánticos acoplados verticalmente, el cual se presenta cuando los QDs crecen uno sobre el otro al ir recubriendo sucesivamente, en la dirección de crecimiento, las películas formadas en estados anteriores, quedando una matriz entre puntos de un material diferente al que los constituye. El otro caso son los llamados QDs acoplados lateralmente, los cuales se encuentran como agrupaciones de dos o más puntos localizados en el mismo plano. Estos sistemas están configurados de tal manera que permiten a los portadores de carga tunelar cuánticamente entre los puntos que los constituyen, pero cada agrupación se encuentra tan separada de sus vecinas que la probabilidad de tunelamiento entre estas es prácticamente cero. La forma más básica de QDM sería por lo tanto aquella que se compone de dos puntos cuánticos acoplados con un único electrón atrapado, la cual se puede considerar como un análogo artificial de la molécula ionizada H_2^+ . Si bien, las QDMs pueden emular propiedades de las moléculas naturales, no es precisamente este rasgo, el que más ha llamado la atención, sino por el contrario, el hecho de ofrecer propiedades completamente diferentes a las de los sistemas naturales ha enfebrecido la imaginación de los investigadores. En este sentido, es de suponer que las QDMs, dado su potencial para crear escenarios que no existen en la naturaleza y sumado al hecho de poder ajustar y controlar sus propiedades con gran precisión, se han convertido actualmente en unas de las nanoestructuras más prometedoras en el campo de las tecnologías de información, para la fabricación de dispositivos de qubits cuánticos, compuertas cuánticas y memorias de excitón-espín, entre otras aplicaciones [Wang et al., 2009, Wu and Wang, 2013].

El estudio de las moléculas de puntos cuánticos se ha constituido como un gran campo de in-

vestigación, tanto desde el punto de vista experimental como teórico, en lo que se refiere a sistemas nanoestructurados, debido a su actualidad, importancia y al potencial de aplicación que ofrece. En un sentido estrictamente teórico, se hace por lo tanto necesario modelar matemáticamente estos sistemas a fin de comprender el comportamiento de los diferentes portadores de carga atrapados en su interior, y de esta manera poder predecir las diferentes propiedades opto-electrónicas que exhibirán. Esto constituyó la motivación del presente trabajo de investigación, en el que se estudia teóricamente el espectro energético de un electrón confinado en un sistema de tres puntos cuánticos idénticos acoplados lateralmente, en diferentes configuraciones geométricas y bajo el efecto de campos magnéticos y eléctricos externos.

1. Marco teórico y estado del arte

Los rápidos progresos conseguidos en los últimos años, en lo que tiene que ver con la fabricación controlada de puntos cuánticos auto-ensamblados (SAQDs, del inglés Self Assembled Quantum Dots), abren nuevas perspectivas en relación con la posible miniaturización de los dispositivos micro- y opto-electrónicos. Dichos puntos pueden confinar en su interior sistemas fermiónicos de pocas partículas que interactúan mutuamente a solo algunos nanómetros de distancia, por lo que su estructura electrónica resulta ser similar a la de un átomo. Esta característica, de suma importancia para su estudio, les ha significado ser catalogados como “átomos artificiales” [Jacak et al., 2012]. Debido a la naturaleza espontánea del proceso de crecimiento de Stranski-Krastanov, estas pequeñas islas emergen de forma tal que sus posiciones están aleatoriamente distribuidas en el sustrato, lo cual se constituye en un problema a la hora de pensar en aprovechar todos los beneficios que los SAQDs pueden ofrecer, ya que para fabricar dispositivos con un comportamiento predecible es esencial tener un ensamble de puntos que presenten uniformidad en el tamaño y que sigan una distribución espacial regular. Con el ánimo de solventar este problema, en los últimos cinco años, se han realizado algunos trabajos en los cuales se muestra que al realizar una variante en el modo de crecimiento, conocida como epitaxia por goteo, tiene lugar la formación de pequeños conglomerados de QDs espacialmente ordenados y de tamaños casi uniformes, los cuales han sido denominados como “moléculas artificiales de puntos cuánticos” (QDMs, del inglés Quantum Dots Molecules). 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, por lo cual se tendrá un acople cuántico entre QDs, similar a lo que ocurre en algunas moléculas naturales donde los diferentes átomos constituyentes pueden compartir uno o más electrones. En otras palabras, las funciones de onda de portadores confinados en diferentes puntos pueden solaparse entre sí y por lo tanto mezclarse para llegar a formar estados orbitales moleculares. Estas QDMs pueden presentar una amplia diversidad de arquitecturas, pues pueden ir desde un par de puntos acoplados lateralmente [Yamagiwa et al., 2006], hasta cadenas lineales de más de 6 puntos [Kanjanchuchai et al., 2009, Fölsch et al., 2014]. También se han obtenido arreglos de 3, 4, o más QDs formando cadenas cerradas de puntos conocidas como moléculas de puntos cuánticos en forma de anillo [Wu and Wang, 2013, Boonpeng et al., 2009]. Otro grado de libertad con que se cuenta, en cuanto al diseño de QDMs, es la morfología que presenten los QDs constituyentes, se han reportado con morfología de lente o anillo.

1.1. Orbitales moleculares

Para comprender la estructura, las propiedades y las formas de interacción de la materia en la escala atómica y subatómica se deben usar los modelos y métodos de la mecánica cuántica. La incorporación de fenómenos como la cuantización de ciertas propiedades físicas y la dualidad onda-partícula permitió explicar la estabilidad de los átomos y predecir adecuadamente las líneas de emisión espectrales, tanto de átomos neutros como de átomos ionizados. De acuerdo a

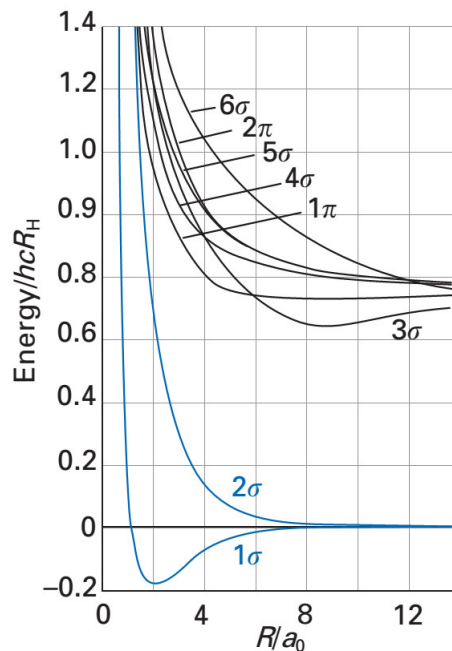


Figura 1: Curvas de energía potencial del H_2^+ . Tomada de [Atkins and Friedman, 2011]

la teoría cuántica, el comportamiento de los electrones en los átomos es descrito por funciones de onda u “orbitales atómicos”, cada uno con una energía característica. En el caso de las moléculas, las posiciones y las energías de los electrones que las conforman se pueden describir en términos de orbitales moleculares (funciones de onda moleculares). El estudio de la estructura molecular es una tarea compleja, puesto que para determinar los orbitales moleculares se debe resolver la ecuación de Schrödinger, pero como hasta la estructura molecular más simple posee tres partículas, encontrar una solución analítica directa no es posible, por lo que es necesario recurrir a técnicas teóricas de aproximación. En primer lugar se adopta la “Aproximación de Born-Oppernheimer” [Bransden and Joachain, 2000], que aprovecha la gran diferencia existente entre las masas de los núcleos y las de los electrones, mientras que las fuerzas a las que ambas partículas están sometidas son de intensidad comparable, generando que el movimiento de los núcleos sea mucho más lento que el de los electrones, y haciendo que ocupen posiciones casi fijas dentro de la molécula. Entonces, es posible determinar los estados electrónicos en cada valor de la separación internuclear, tratando los movimientos electrónicos y nucleares independientemente.

Aun empleando la aproximación de Born-Oppernheimer solo hay una especie molecular para la cual la ecuación de Schrödinger posee solución analítica, el ion molecular di-hidrógeno (H_2^+), el cual está constituido por dos protones y un único electrón compartido, unidos mediante un enlace covalente. En la figura 1 se presentan las curvas de energía de los primeros niveles en función de la distancia internuclear, en ellas se observa como la energía aumenta a medida que la separación entre los núcleos tiende a cero, mientras que cuando esta se hace grande, la energía tiende a los valores típicos de un átomo de hidrógeno. La curva más baja posee un minino cerca a la posición de dos radios de Bohr ($2a_0 = 106 pm$) y su energía toma un valor de

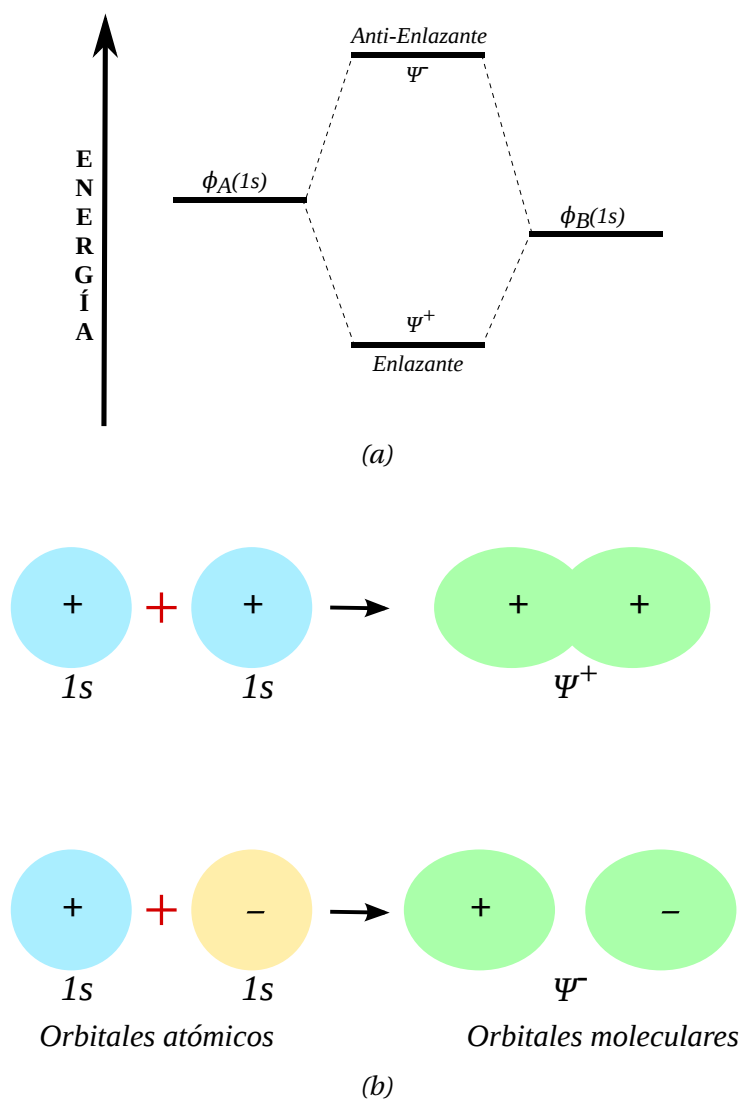


Figura 2: (a) Energías relativas de orbitales moleculares y sus orbitales atómicos constituyentes. (b) Combinación de orbitales atómicos $1s$ para formar orbitales moleculares

aproximadamente $2,7\text{eV}$ por debajo de la energía de un átomo de Hidrógeno y un protón separados, lo que indica que esta molécula es estable, pues posee una energía más baja que sus productos de disociación y su longitud de enlace está cercana a los [Atkins and Friedman, 2011].

Para determinar orbitales moleculares de estructuras más complejas se puede emplear diferentes métodos, uno de ellos es el método CLOA (combinación lineal de orbitales atómicos), que considera a los orbitales moleculares como combinaciones lineales de orbitales atómicos ($\Psi = \sum_r c_r \phi_r$). Pero para el caso de moléculas diatómicas se toman como base aquellos orbitales atómicos que posean la misma simetría con respecto a rotaciones alrededor del eje internuclear y energías similares [Cartmell and Fowles, 2013]. En el marco de esta aproximación, las dos primeras funciones de onda de la molécula H_2^+ se pueden expresar como una combinación de los orbitales atómicos $1s$ del hidrógeno, lo que da lugar a dos orbitales moleculares, correspondientes a las curvas más bajas de energía potencial en la figura 1 uno **enlazante** (1σ), obtenido a partir de la suma de las funciones de onda base ($\Psi_+ \approx \phi_A(1s) + \phi_B(1s)$), y correspondiente a la situación en la cual hay una acumulación de densidad electrónica en la región entre los núcleos; y otro **anti-enlazante** (2σ), encontrado al restar los orbitales atómicos ($\Psi_- \approx \phi_A(1s) - \phi_B(1s)$), y que representa un estado en el cual se ha disminuido la probabilidad de encontrar al electrón en la región inter-nuclear. En la figura 2 se muestran representaciones esquemáticas de las energías relativas de los orbitales moleculares más bajos y de la formación de orbitales moleculares por combinación de orbitales atómicos. Este método permite estimar los orbitales moleculares de moléculas con un número más grande de átomos, en general la combinación de n (par) orbitales atómicos produce n orbitales moleculares, con $n/2$ enlazantes y $n/2$ anti-enlazantes.

En la molécula de hidrógeno (H_2), la cual está compuesta por dos átomos de hidrógeno unidos mediante un enlace covalente, también se emplean las funciones del onda tipo hidrogenoide para formar los orbitales moleculares. De esta manera se obtiene también un estado base enlazante 1σ , el cual posee un electrón más que en el caso del ion molecular, y constituye por lo tanto un enlace más fuerte que el presente en la molécula H_2^+ , con una longitud de enlace de aproximadamente 74pm . Los orbitales moleculares de moléculas poli-atómicas también se pueden estimar por medio de CLOA, pero al poseer un número mayor de átomos, el número de orbitales base también se aumenta, es por esto que se recurre a considerar los elementos de simetría de las moléculas y formar las combinaciones lineales con orbitales que pertenezcan a especies específicas de simetría, lo que se conoce como la construcción de una combinación lineal de simetría-adaptada (CLSA), en el caso de que la molécula no posee elementos de simetría se debe calcular cada orbital molecular con la base completa.

1.2. Fabricación de puntos cuánticos acoplados lateralmente

Los puntos cuánticos pueden ser fabricados como inclusiones semiconductoras con una brecha de energía prohibida (bandgap) estrecha en una matriz de otro material semiconductor con gap más grande. Una de las técnicas más convenientes para producir QDs es la conocida como autoensamblado, la cual está basada en el modo de crecimiento de Stranski-Krastanov (SK) realizado durante un crecimiento epitaxial de materiales con constante de red desigual.

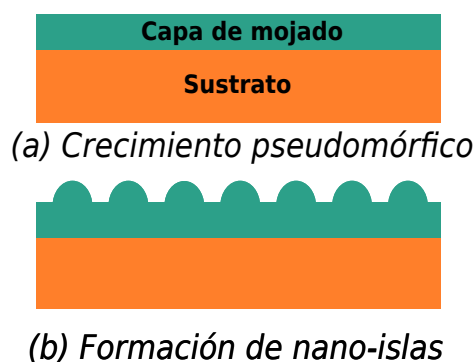


Figura 3: (a) Ilustración del régimen de crecimiento pseudomórfico. (b) Posterior formación de nano-islas durante el modo de crecimiento Stransky-Krastanov.

Tal método se basa en la propulsión de los elementos constituyentes del material a crecer, en forma de haces moleculares, hacia un sustrato cristalino sobre el cual se formará la película epitaxial en crecimiento y permite la obtención de puntos cuánticos autoensamblados debido a la relajación de energía elástica producida por la diferencia en las constantes de red del material a depositar y el sustrato. Los cristales de InAs y GaAs poseen diferentes constantes de red, $6.05\text{\AA}$ y $5.65\text{\AA}$, respectivamente, que conduce a un desacople de redes de aproximadamente el 7%. En las etapas iniciales del depósito de InAs, éste crece acoplado a la red cristalina del sustrato GaAs. A esta primera capa que cubre toda la superficie del sustrato se le conoce como capa de mojado. Sin embargo, los esfuerzos debidos al desajuste de los parámetros de red provocan la deformación elástica del InAs acumulando energía elástica conforme avanza el crecimiento. A esta etapa del crecimiento se le denomina régimen pseudomórfico. Con el aumento del volumen de InAs depositado, la energía elástica se va acumulando. Esta situación persiste hasta alcanzar un determinado espesor, denominado espesor crítico, para el que la energía acumulada se libera mediante la formación espontánea (o autoensamble) de nano-islas tridimensionales de InAs [López López and Méndez García, 2008].

Debido a que el crecimiento de puntos cuánticos autoensamblados generalmente se da en una configuración aleatoria, la probabilidad de formar QDs suficientemente cercanos para presentar interacción electrónica es extremadamente baja. Por lo tanto, se necesitan protocolos especiales de crecimiento para producir moléculas de puntos cuánticos laterales de forma controlada, los cuales se basan en el uso de pequeñas modulaciones superficiales que actúan como posiciones preferenciales de nucleación. Una de las formas de lograr el crecimiento de QDMs es por medio de la fabricación intencional de nano-huecos poco profundos cuya formación puede conseguirse por diferentes técnicas, entre las cuales se encuentran: el grabado in situ con AsBr_3 y la técnica de grabado epitaxial por goteo [Wu and Wang, 2013]. En la figura 4 se presenta el crecimiento de nano-huecos por medio de epitaxia de haces moleculares y grabado in situ con AsBr_3 , se comienza con un punto de InAs crecido en un sustrato de GaAs, posteriormente se recubre con una capa de GaAs, luego se realiza el grabado in situ con AsBr_3 formando el nano-hueco, después se deposita InAs lo que permite el crecimiento de la molécula de dos puntos cuánticos [Wang et al., 2009].

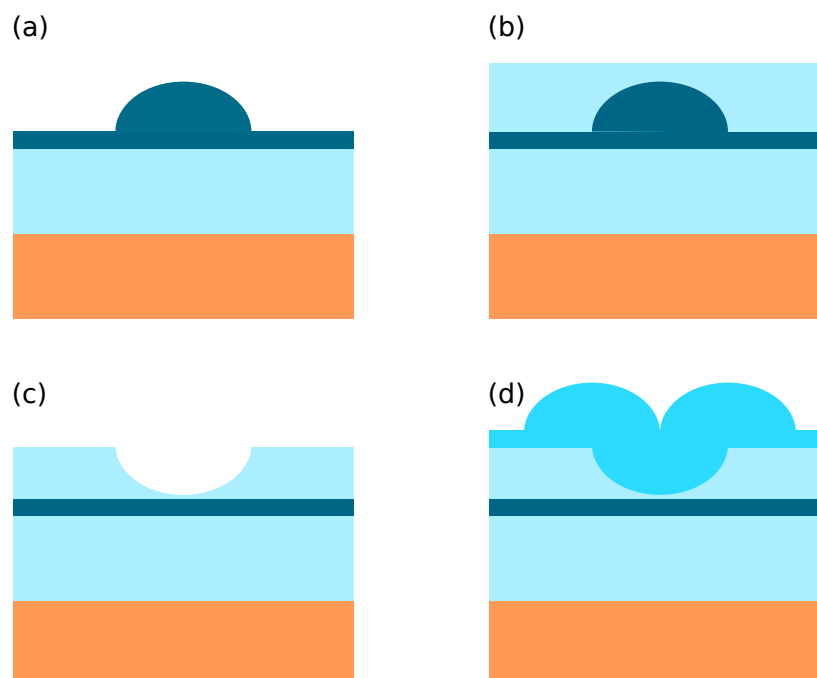


Figura 4: Ilustración esquemática del proceso para fabricar moléculas de dos QDs acoplados lateralmente de InGaAs, (a) Puntos cuánticos de InAs sobre un sustrato de GaAs, (b) recubrimiento de los QD con 10 nm de GaAs, (c) nano-hueco producido por grabado in situ con $AsBr_3$, (d) formación de QDM alrededor del hueco debido al rellenado de los nanoagujeros con InGaAs diluido.

El número de puntos cuánticos en una QDM fabricada por la combinación del método de epitaxia de haces moleculares y el grabado con $AsBr_3$ se puede graduar variando los parámetros de crecimiento, particularmente la temperatura del sustrato y la cantidad de material constituyente de los puntos depositado. En la figura 5 se muestran imágenes de microscopia atómica de moléculas artificiales constituidas por dos, tres, cuatro y seis puntos cuánticos, las cuales fueron obtenidas al cambiar la temperatura del sustrato durante la deposición del InAs desde 450°C hasta 500°C y la cantidad de InAs de 1.8 a 2.5 ML [Schmidt, 2007].

1.3. Estudios teóricos sobre puntos cuánticos acoplados

El poder comprender los fenómenos físicos que surgen en los llamados “átomos artificiales” despertó un notable interés de los investigadores teóricos, de tal manera que a la fecha es grande el volumen de trabajos realizados en los que se trata de simular las condiciones de confinamiento cuántico que imponen los puntos con diferentes perfiles, su reacción ante la presencia de campos eléctricos y magnéticos externos, y el comportamiento de las propiedades físicas de los sistemas de pocas partículas confinados en su interior, los cuales pueden ser: sistemas de uno o varios portadores de carga del mismo signo, como electrones o huecos, sistemas con car-

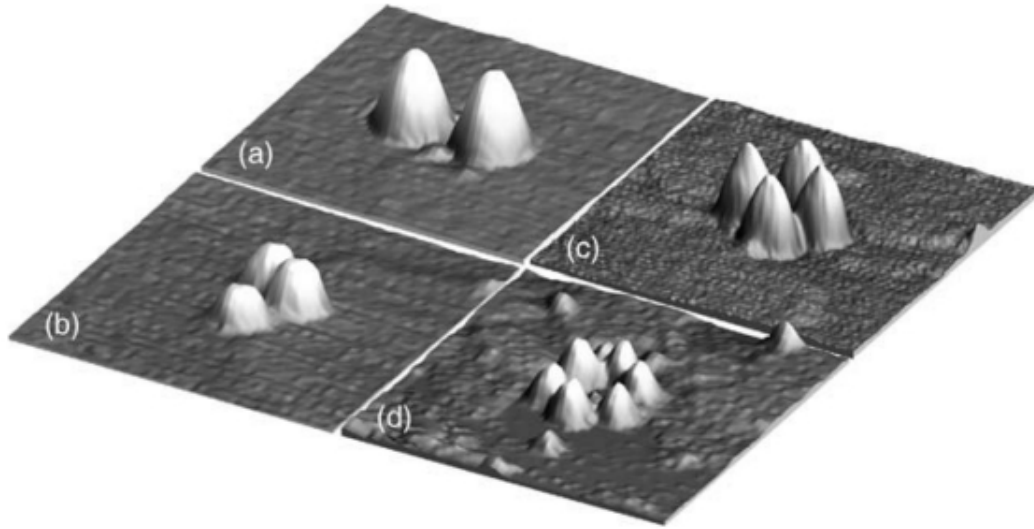


Figura 5: Imágenes de AFM de estructuras multimoleculares fabricadas por deposición de diferentes cantidades de InAs sobre nano-huecos a diferentes temperaturas del sustrato. (a) 2.5 ML a 500 °C, (b) 1.8 ML InAs a 470 °C, (c) 2.0 ML InAs a 470 °C y (d) 1.8 ML InAs a 450 °C. Figura tomada de [Schmidt, 2007]

gas de signo opuesto que pueden formar estados ligados como excitones, triones, biexcitones, entre otros. Muestra de ello es el considerable volumen de trabajos teóricos realizados a la fecha sobre QDs aislados y acoplados verticalmente, considerando diversas morfologías, para lo cual se han implementado una amplia variedad de técnicas analíticas y numéricas que van desde modelos con solución exacta y métodos variacionales, hasta sofisticados métodos numéricos en la base elementos finitos y simulación Monte Carlo. Vale la pena resaltar que algunos temas relacionados con sistemas de pocas partículas confinados en QDs aislados y acoplados verticalmente han sido ampliamente abordados en nuestro grupo de investigación [Gutiérrez Niño, 2011, Marin, 2008, García Russi, 2007].

Si bien existe un amplio número de investigaciones sobre QDs aislados y acoplados verticalmente, no ocurre lo mismo en relación con sistemas de QDs acoplados lateralmente o las denominadas QDMs. Dentro de los trabajos teóricos que se han realizado sobre un par de QDs acoplados lateralmente se tienen: el de Corredor y Gutiérrez, en el que se estudió el espectro de energía y la distribución de probabilidad de un electrón en un par de discos cuánticos acoplados lateralmente bajo un campo eléctrico externo aplicado en dirección paralela al plano de crecimiento mediante el método de elementos finitos bidimensionales [Corredor and Gutiérrez, 2014]; Muñoz y colaboradores realizaron el cálculo de los dos primeros niveles energéticos de un electrón en un par de discos cuánticos acoplados lateralmente inmersos en un campo magnético externo, mediante una combinación lineal adecuadamente simetrizada de las funciones de onda correspondientes a un solo QD [Muñoz et al., 2003]; Cha y Chung calcularon el espectro energético de un electrón en un par de QDs acoplados con confinamiento parabólico mediante el método de diagonalización exacta [Cha and Chung, 2002]; Peng y coinvestigadores analizaron las propiedades eléctricas y ópticas de electrones y huecos bajo un campo magné-

tico externo mediante una metodología en la cual se hace una expansión de las funciones de onda del sistema en términos de funciones de Bloch para el bloque y se considera un pseudopotencial empírico en el Hamiltoniano [Peng et al., 2010]. En otra investigación reciente, realizada por Baruffa y colaboradores, se consideraron los efectos del acople espin-orbita sobre el espectro de dos electrones confinados en un par de QDs acoplados lateralmente [Baruffa et al., 2010]. También, Barticevic y otros, llevaron a cabo el estudio teórico de los niveles energéticos de un excitón confinado en un par de QDs acoplados lateralmente, bajo confinamiento magnético, el cual se realizó en el marco de un procedimiento variacional [Barticevic et al., 2009]. Otros trabajos relevantes son: el análisis del efecto de una impureza sobre una QDM de dos QDs, cada uno con uno o dos electrones y una impureza cargada, el cual se realizó mediante el método aproximado de interacción de configuraciones por Nguyen y Sarma [Nguyen and Sarma, 2011b, Nguyen and Sarma, 2011a] y el cálculo de los estados energéticos de un electrón y un hueco en un par de puntos cuánticos acoplados lateralmente, realizado por medio de un esquema numérico sin malla desarrollado por Londoño y coinvestigadores [Londoño et al., 2015].

Para el caso particular de sistemas de tres QDs acoplados lateralmente se han realizado algunos estudios entre los que se encuentran: el realizado por Korkusinski y coinvestigadores, en el que analizan teórica y experimentalmente la estructura electrónica de una molécula triangular de tres QDs con un electrón en cada QD usando el modelo de Hubbard y diagonalización exacta [Korkusinski et al., 2007, Hsieh et al., 2012]; Jai Seok Ahn desarrollo un método basado en diferencias finitas aplicable a puntos cuánticos 2D, con el cual examino dos y tres pozos armónicos truncados como modelos realísticos de potencial para moléculas de dos y tres QDs [Ahn, 2014]; y el realizado por Ren y colaboradores, en el que investigan el espectro energético de tres electrones dentro de una estructura de SiGe/Si/SiGe formada por tres puntos cuánticos, en configuraciones triangular equilátera y lineal, empleando el método de diagonalización exacta [Ren et al., 2014]. Por otro lado es interesante resaltar los estudios de los estados moleculares de uno, dos y tres electrones en un par de anillos cuánticos acoplados lateralmente en presencia de campo magnético realizados por Climente y Planelles [Climente and Planelles, 2008] y por Chwiej y Szafran [Chwiej and Szafran, 2008], como también el sistema coplanar de multiples anillos acoplados electrostáticamente cada uno cargado con un electrón, el cual fue analizado vía la aproximación de interacción de configuraciones por Szafran [Szafran, 2008].

2. Modelado matemático y simulación

En el presente trabajo se estudia teóricamente el espectro energético de un electrón confinado en una nanoestructura constituida por tres puntos cuánticos idénticos acoplados lateralmente, en diferentes configuraciones geométricas y bajo el efecto de campos magnéticos y eléctricos externos. En este capítulo se presentan las geometrías del sistema analizadas, sus parámetros estructurales, la ecuación de Schrödinger que lo describe y el método empleado para resolverla.

2.1. Modelo estructural

El sistema estudiado consta de un electrón confinado en una "molécula artificial" de tres puntos cuánticos autoensamblados idénticos acoplados lateralmente. Debido a que este tipo de estructuras son capas delgadas, y en la mayoría de las ocasiones tienen una relación pequeña entre las dimensiones de su altura y su base, se consideró un modelo bidimensional en el cual cada uno de los QDs tenía forma circular. Con el fin de obtener resultados que permitieran analizar cualitativamente la evolución de los niveles energéticos de un electrón confinado en el sistema ante una transformación topológica de la estructura, desde una molécula artificial triangular a una lineal, inicialmente se adoptó un modelo en el que los centros de los tres puntos cuánticos se encontraban sobre los vértices de un triángulo equilátero de lado d tal como se muestra en la figura 6a. La transformación en la configuración geométrica del sistema se llevó a cabo reduciendo el parámetro h , que es la distancia que separa el centro del QD1 con la línea que une el centro del QD2 con el QD3 (Figura 6a), mientras se mantuvieron fijas las separaciones entre el centro del QD1 con los otros dos. En el estado final de la transformación, esto es cuando h sea cero, se obtuvo una estructura de molécula lineal cuyos centros están separados

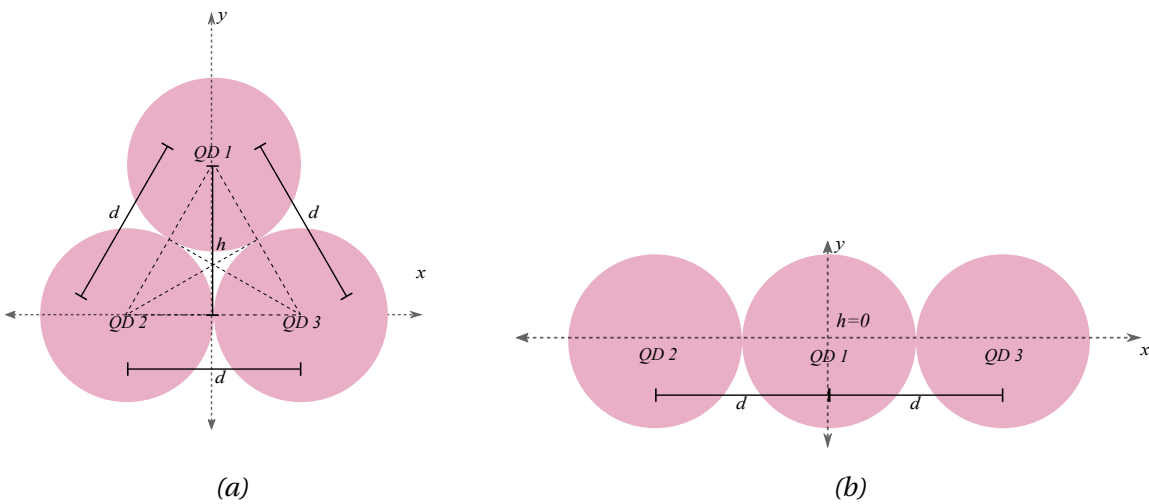


Figura 6: Esquema de la vista superior del sistema de tres puntos cuánticos acoplados lateralmente. a) Configuración triangular b) Configuración lineal

una distancia d entre vecinos adyacentes, la cual se muestra en la figura 6b.

Dado que los puntos cuánticos considerados son mucho más grandes que el tamaño de la celda unidad del material, resulto conveniente hacer uso de la aproximación de masa efectiva. En la tabla 1 se relacionan los parámetros de los materiales de la estructura dentro del marco de dicha aproximación.

Tabla 1

Parámetros de los materiales, extraídos de [Levinshtein et al., 1996]

	InAs	GaInAs	GaAs
Constante de red $a[nm]$	0.6058	0.5869	0.5653
Masa relativa de electrón $\frac{m_e^*}{m_e}$	0.023	0.041	0.063
Constante dieléctrica estática (permitividad relativa)	15.1	13.9	12.9

2.2. Ecuación de Schrödinger

El comportamiento cuántico de un electrón confinado espacialmente por una estructura y bajo el efecto de campos externos, tanto eléctricos como magnéticos, puede describirse mediante la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo con el siguiente Hamiltoniano:

$$H = \frac{1}{2m^*} [\vec{p} - e\vec{A}]^2 + eF\vec{r} + V(x, y, z) \quad (1)$$

Para el problema particular del presente trabajo, se tiene que el movimiento del electrón está restringido a una región completamente bidimensional, y además se halla en presencia de un campo eléctrico uniforme F orientado en el plano estructural y de un campo magnético uniforme B en la dirección de crecimiento. Al hacer uso del Gauge de Coulomb $\left(\vec{A} = \frac{1}{2}(\vec{B} \times \vec{r})\right)$, se tiene que el Hamiltoniano del sistema toma la forma siguiente:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{ei\hbar B}{2m^*} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{e^2 B^2}{8m^*} (x^2 + y^2) + eFr(x, y) + V(x, y) \quad (2)$$

Entonces la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo para este caso es:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 + \frac{ei\hbar B}{2m^*} \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{e^2 B^2}{8m^*} (x^2 + y^2) + eFr(x, y) + V(x, y) \right] \psi(x, y) = E\psi(x, y) \quad (3)$$

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

$$V(x, y) = \begin{cases} 0; & \text{dentro de los QDs} \\ \infty; & \text{fuera de los QDs} \end{cases} \quad (4)$$

2.3. Método de solución

Con el fin de solucionar la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo 3 se empleó el software COMSOL Multiphysics[®] [COMSOL Inc., 2015], el cual permite resolver ecuaciones diferenciales parciales (PDEs, del inglés *partial differential equations*) por medio de la implementación del método de elementos finitos (FEM, del inglés *Finite element method*) que consiste en dividir, o discretizar, el dominio de solución en pequeñas regiones, o elementos, y luego desarrollar una solución aproximada para la PDE de cada uno de estos elementos. Tal solución se genera, enlazando las soluciones individuales sin descuidar la continuidad en las fronteras de las pequeñas regiones.

Para poder realizar la discretización del problema es necesario realizar su "formulación débil" o "formulación variacional", la cual requiere multiplicar la ecuación diferencial por una función de prueba y luego integrar sobre el dominio [Johnson, 2009]. Una ventaja que ofrece el software es que permite escribir la ecuación diferencial, el problema de valores y vectores propios a resolver, en "forma de coeficientes", es decir, especificando el valor de los coeficientes que acompañan a cada uno de los términos de la ecuación 5, para realizar la discretización internamente.

$$\lambda^2 e_a u - \lambda d_a u + \nabla \cdot (-c \nabla u - \alpha u + \gamma) + \beta \cdot \nabla u + a u = f \quad (5)$$

La ecuación a resolver 3 se escribió en "forma de coeficientes" asignando a cada término los valores presentados en 6. El software permite: escoger el tipo de elemento finito a usar y su orden; el tamaño y la forma de la malla; y definir las condiciones de contorno del problema. Se trabajó con elementos de tipo Lagrange, en forma triangular y con condiciones de frontera de Dirichlet.

$$\left\{ \begin{array}{l} e_a = 0 \\ d_a = 1 \\ c = \frac{\hbar^2}{2m^*} \\ \alpha = [0, 0] \\ \gamma = [0, 0] \\ \beta = \frac{e i \hbar B}{2m^*} [-y, x] \\ a = \frac{e^2 B^2}{8m^*} (x^2 + y^2) + e F r(x, y) \\ f = 0 \end{array} \right. \quad (6)$$

Con el ánimo de validar el método de solución del problema se analizó un trabajo realizado por Lent [Lent, 1991], en el que se calculan los estados energéticos de un punto cuántico circular en presencia de un campo magnético perpendicular, problema al que se reduce nuestra ecuación

Tabla 2

Resultados del estado base de un QD circular, realizando un refinamiento de malla para elementos Lagrangianos de segundo y tercer orden

Orden elemen- to	Energía E_0 [meV]	t_{sol} [s]	Malla	
			Tamaño	Gráfico
2	1.762	1	Extremadamente gruesa (40 elementos de dominio y 12 elementos de contorno)	
3	1.7626	1		
2	1.7632	1	Extra gruesa (72 elementos de dominio y 16 elementos de contorno)	
3	1.7627	1		
2	1.7628	1	Más gruesa (170 elementos de dominio y 24 elementos de contorno)	
3	1.7627	1		
2	1.7627	1	Gruesa (250 elementos de dominio y 32 elementos de contorno)	
3	1.7627	1		
2	1.7627	1	Normal (546 elementos de dominio y 48 elementos de contorno)	
3	1.7627	1		
2	1.7627	1	Fina (936 elementos de dominio y 60 elementos de contorno)	
3	1.7627	1		
2	1.7627	1	Más Fina (1910 elementos de dominio y 88 elementos de contorno)	
3	1.7627	2		
2	1.7627	2	Extra fina (6538 elementos de dominio y 160 elementos de contorno)	
3	1.7627	4		
2	1.7627	6	Extremadamente fina (24770 elementos de dominio y 316 elementos de contorno)	
3	1.7627	15		

cuando la distancia d entre los tres puntos y el campo eléctrico externo son iguales a cero. En tal investigación se considera un potencial de tipo barrera infinita (4), una masa efectiva para el electrón de $0,05m_e$, un radio del punto de $500\text{\AA}$ y se introduce un parámetro adimensional de campo magnético $\beta = \frac{eB\pi R^2}{\pi\hbar}$. Empleando los parámetros mencionados anteriormente, se realizó el cálculo del estado base para probar la validez de nuestro método. Se realizaron varias pruebas con ordenes cuadrático y cubico del elemento y reduciendo el tamaño de la malla, por medio de la opción del software, para verificar la convergencia de la solución. En la tabla 3 se presentan la energía del estado base (E_0) calculada para cada orden del elemento y tamaño de la malla utilizados, además de el tiempo de computo (t_{sol}) en cada caso y la representación gráfica de la malla. Se observa que la solución converge hacia una energía de $0,0017627[eV]$.

Luego se reprodujo la variación de los niveles energéticos con el campo magnético presentada por el autor del artículo, con elementos de orden cubico y una malla "extra fina". La figura 8 presenta una comparación entre las dos soluciones, en donde se observa que el comportamiento de los niveles energéticos en función del parámetro β es el mismo, lo que permite concluir que el método empleado es válido para solucionar la ecuación de Schrödinger de nuestro problema.

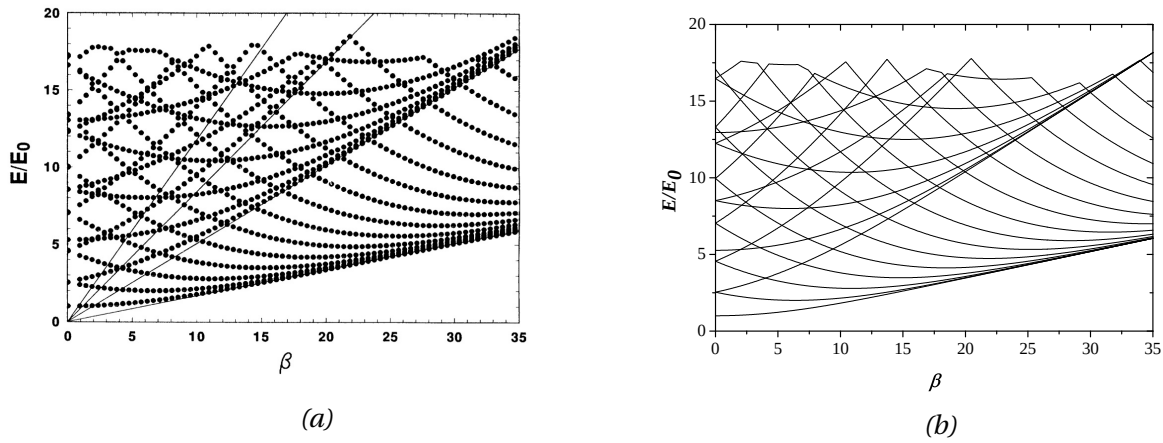


Figura 8: Comparación de la gráfica de los primeros niveles energeticos en función de la variable β . a) Obtenida por Lent [Lent, 1991]. b) Calculados con el modelo realizado en COMSOL Multiphysics[®].

En los cálculos realizados, cuyos resultados se presentan más adelante, se emplean el mismo orden del elemento y tamaño de malla que en la reproducción del trabajo de Lent.

3. Análisis de resultados

En el presente capítulo se muestran los resultados obtenidos de los cálculos realizados para el sistema en estudio. Se clasifican de acuerdo a la morfología de la molécula y en cada sección aparecen el análisis de las diferentes combinaciones de campos externos aplicados para cada forma. En primer lugar se presenta el sistema de tres puntos cuánticos en configuración de triángulo equilátero, como el de la figura 6a; se sigue con la molécula lineal (figura 6b); y por ultimo, se exhibe el análisis de la transformación topológica realizada.

3.1. Molécula triangular

A continuación se presentan los resultados obtenidos para un electrón de conducción confinado en un sistema de tres puntos cuánticos circulares de radio $50nm$ y acoplados lateralmente en una configuración de triángulo equilátero, tal como se puede ver en la figura 6a. Como ya se ha mencionado antes, dicha estructura puede considerarse como una molécula triangular de tres puntos cuánticos (TTQDM- Triangular Triple Quantum Dot Molecule). Con el objeto de estudiar el grado de acople cuántico entre los QDs constituyentes, se han calculado los primeros niveles energéticos en función de la separación entre puntos, manteniendo invariante la configuración equilátera. Los resultados de dichos cálculos se pueden apreciar en la figura 9. Dos configuraciones límite se obtienen para los valores extremos de la distancia entre los centros de los QDs. Cuando $d = 0nm$, los tres QDs se superponen completamente y se tiene un único QD circular cuyos valores de energía corresponden con los niveles de un disco cuántico de dos dimensiones, los cuales están doblemente degenerados respecto al número cuántico orbital m (para $m \neq 0$). En la figura 10 se muestra la densidad electrónica correspondiente a los 12 primeros estados para cuatro valores diferentes de la separación entre puntos. Para el caso cuando $d = 0nm$ los estados se han etiquetado como $1s$, $1p$, $1d$, $2s$,...etc, usando la notación de orbitales atómicos, dado que dicho sistema se puede considerar como un átomo de hidrógeno artificial. Cuando $d = 100nm$, el solapamiento entre QDs adyacentes se reduce a un punto de contacto y se tiene por tanto un sistema de tres QDs prácticamente aislados. En la figura 9 se observa cómo los niveles de energía corresponden con los del caso anterior (un único QD), pero ahora con un triple degeneramiento adicional, como era de esperarse. Se puede apreciar también en la figura 10, como los orbitales para el sistema de tres QDs conforman capas según sea la naturaleza de los orbitales de los QDs individuales. La capa de energía más baja, tipo s , está conformada por los tres orbitales más bajos, los cuales no poseen nodos en ninguno de los tres QDs. La siguiente capa será tipo p , y está conformada por los siguientes seis orbitales, los cuales se pueden considerar como combinación de orbitales $1p$. Esto se aprecia también en la estructura de los niveles de energía (parte derecha de la figura 9), evidenciándose que una TTQDM posee una estructura electrónica por capas constituidas con tres veces el número de orbitales que corresponden a un único QD. Ya que en este caso la simetría circular no se conserva, los números cuánticos radial y orbital de un QD circular, en general, ya no son apropiados, aunque, como se muestra en la Fig. 10, las funciones propias pueden, en algunos casos, conservar fuertes características de simetría circular. Para caracterizar las eigenfunciones y valores

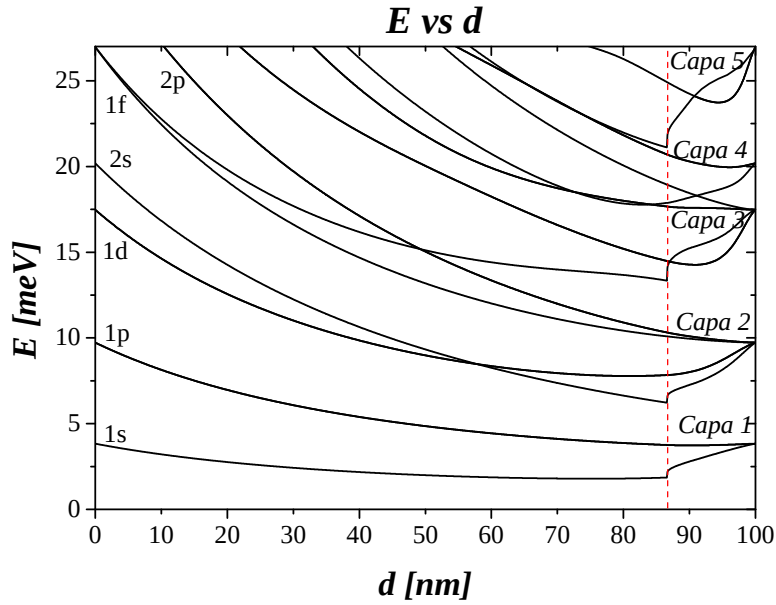


Figura 9: Niveles de energía más bajos como función de la distancia entre los centros de los QDs para la TTQDM, sin campos externos.

propios del sistema molecular, usamos ψ_i^k y ϵ_i^k respectivamente, donde i es el número de la capa y k define el orden de aparición del orbital dentro de una capa, de esta manera los estados correspondientes quedan etiquetados como (i, k) , como puede apreciarse en la columna derecha de la figura 10.

Para el conjunto de configuraciones que se dan entre estos dos casos límite mencionados anteriormente se tiene que a medida que aumenta la distancia entre los QDs, es decir cuando el sistema experimenta una transición de un QD a un sistema de 3 QDs acoplados, el espectro de energía muestra cambios importantes. Un primer rasgo, que a primera vista llama la atención, es el hecho de que algunos niveles muestran un incremento abrupto en la energía cuando la distancia entre QDs se acerca a los 87 nm . Este interesante comportamiento está relacionado con un cambio en la topología de la estructura, pues cuando la separación entre QDs supera el valor $\sqrt{3}R \approx 86,6\text{ nm}$, entonces tiene lugar la aparición de un agujero en el centro de la estructura, lo cual lleva a que la estructura deje de ser simplemente conexa y por otra parte, a que el confinamiento sobre el electrón se incremente llevando a un ascenso en la energía. Analizando los gráficos de densidad electrónica, en la figura 10, se observa cómo los estados que tienen el máximo valor de su densidad de probabilidad en el centro de la estructura, esto es, los estados $(1,1)$ $(2,1)$ y $(3,1)$, son los que sufren un incremento abrupto en su energía, pues al aparecer el hueco central, la densidad de probabilidad se torna cero en el interior y en el contorno de dicho agujero. En el gráfico 9 se observa un doble régimen en el comportamiento de los niveles de energía, uno para la región antes de la línea roja a trazos, para $d < 86,6\text{ nm}$, la cual corresponde a configuraciones sin el hueco central, y la otra región después de la línea roja a trazos, la cual corresponde a configuraciones con hueco central. Para las configuraciones con geometría simplemente conexa se observa cómo todos los niveles decrecen monótonamente con el incremento de la separación entre QDs y por lo tanto no tiene lugar la aparición de esta-

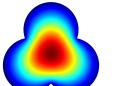
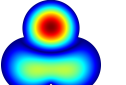
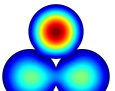
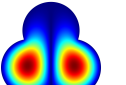
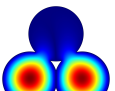
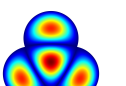
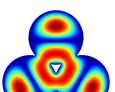
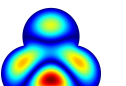
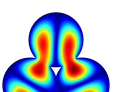
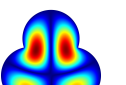
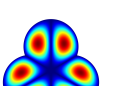
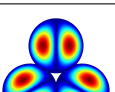
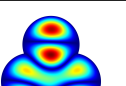
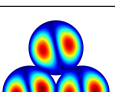
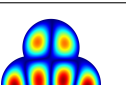
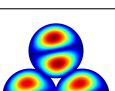
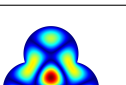
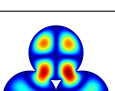
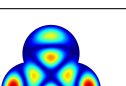
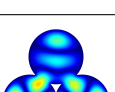
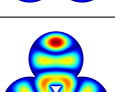
Estado	Distancia				Capa	Estado
	$d = 0nm$	$d = 50nm$	$d = 75nm$	$d = 95nm$		
1s					1	(1,1)
1p					1	(1,2)
1p					1	(1,3)
1d					2	(2,1)
1d					2	(2,2)
2s					2	(2,3)
1f					2	(2,4)
1f					2	(2,5)
2p					2	(2,6)
2p					3	(3,1)
1g					3	(3,2)
1g					3	(3,3)

Figura 10: Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración triangular, sin campos externos.

dos moleculares enlazantes y antienlazantes. Caso diferente ocurre con las configuraciones de la región derecha, para $86,6nm < d < 100nm$, donde se observa cómo a medida que d decrece tiene lugar un desacople de los niveles, según el grado de degeneramiento, en energías que crecen y están asociadas con estados moleculares antienlazantes, y energías que decrecen, las cuales están asociadas con estados enlazantes. Este comportamiento típico de sistemas moleculares se manifiesta claramente en las densidades electrónicas de dichos estados mostradas en la figura 10, donde se aprecia cómo los estados (1, 1), (2, 1), (2, 2), (2, 3), (3, 1), (3, 2) y (3, 3), correspondientes a los niveles 1, 3, 4, 7 y 8, exhiben un carácter molecular enlazante, mientras que los demás muestran un carácter antienlazante.

Esta estructura presenta una interesante simetría, análoga a la de la molécula de amoníaco $-NH_3$, por lo que pertenece al grupo puntual C_{3v} , dado que presenta simetría para rotaciones de $2\pi/3 [rad]$ respecto al eje mayor, ya sea en sentido de las manecillas del reloj o al contrario, y para reflexiones respecto a los 3 planos verticales que bisectan cada uno de los 3 ángulos de los vértices del triángulo. De hecho, esta simetría es la causa del doble degeneramiento que se observa en los niveles tipo p y d para cualquier separación entre QDs. Por el contrario, el nivel 1f se desdobra en dos niveles al incrementarse la separación entre QDs, muestra de que la simetría de la estructura no es suficiente para mantener el degeneramiento.

A manera de ilustración se han obtenido los orbitales moleculares como combinación lineal de los orbitales de tipo atómico de los QDs individuales. Si denotamos como s_1 , s_2 y s_3 , los orbitales tipo 1s para cada uno de los tres QDs circulares, entonces los orbitales moleculares correspondientes a los primeros 3 estados se obtienen con las siguientes combinaciones de los mismos:

$$\psi_1^1 = s_1 + s_2 + s_3 \quad (7a)$$

$$\psi_1^2 = -s_1 + \frac{1}{2}(s_2 + s_3) \quad (7b)$$

$$\psi_1^3 = s_2 - s_3 \quad (7c)$$

Claramente se observa que dichos orbitales son ortogonales, y que los estados ψ_1^1 , ψ_1^2 y ψ_1^3 corresponden con las densidades electrónicas obtenidas en nuestros cálculos, las cuales se muestran en las tres primeras filas de la figura 10, cuyos estados se han etiquetado como (1, 1), (1, 2) y (1, 3). Por otro lado, se puede probar el doble degeneramiento de los estados ψ_1^2 y ψ_1^3 si consideremos la transformación de las combinaciones (7b y 7c) bajo las operaciones de simetría del grupo C_3^+ y σ_v . Luego de aplicar una rotación C_3^+ (rotación de 120° en sentido horario) se obtienen las siguientes funciones de onda:

$$\psi_1^{2'} = -s_2 + \frac{1}{2}(s_3 + s_1) \quad (8a)$$

$$\psi_1^{3'} = s_3 - s_1 \quad (8b)$$

Se puede probar fácilmente que de las ecuaciones (7b,7c) y (9a,9b) se obtiene:

$$\psi_1^{2'} = -\frac{1}{2}\psi_1^2 - \frac{3}{4}\psi_1^3 \quad (9a)$$

$$\psi_1^{3'} = \psi_1^2 - \frac{1}{2}\psi_1^3 \quad (9b)$$

Para la reflexión σ_v respecto al plano vertical, el cual corresponde al plano yz en la figura 6a, que pasa por el centro del QD1 se tiene que:

$$\psi_1^{2'} = -s_1 + \frac{1}{2}(s_2 + s_3) = \psi_1^2 \quad (10a)$$

$$\psi_1^{3'} = s_2 - s_3 = -\psi_1^3 \quad (10b)$$

De lo anterior se ve que las funciones de onda de los estados 2 y 3 se pueden obtener como una combinación lineal entre sí, por lo cual dichos estados son degenerados.

Otro aspecto interesante que se aprecia en los gráficos de densidad electrónica de la figura 10 es el carácter de *estado oscuro* (dark state) que se manifiesta en el estado ψ_1^3 , y de manera más clara, cuando $d = 95nm$. Dicho estado muestra que la probabilidad de encontrar el electrón en el QD1 es cero, debido a un proceso de interferencia destructiva de las funciones de onda electrónicas, lo cual desacopla uno de los QDs del sistema, en este caso el QD1. Este tipo de estados se observó inicialmente en sistemas atómicos de 3 niveles [Whitley and Stroud Jr, 1976, Xia et al., 2015].

Importantes fenómenos se dan cuando tenemos sistemas de QDs, ya que cuando el sistema está en un estado oscuro, da como resultado el atrapamiento coherente de un electrón y, en consecuencia, una fuerte supresión de la corriente estacionaria a través de la estructura [Michaelis et al., 2006, Emary, 2007]. El sistema deja de absorber radiación resonante y lleva a lo que se denomina la transparencia inducida electromagnéticamente. Se ha encontrado que en sistemas naturales de recolección de luz, los estados oscuros creados por un fuerte acoplamiento entre cromóforos pueden mejorar la eficiencia de conversión de energía. Los estados oscuros en QDs también gozan de gran interés porque abren la posibilidad de construir varios dispositivos de lógica cuántica, así como memorias cuánticas [Aharon et al., 2016].

3.1.1. Efecto de campo magnético

Con el objeto de estudiar el efecto que produce la aplicación de un campo magnético uniforme en dirección perpendicular al plano de la estructura sobre el espectro energético del sistema, a continuación se muestran las dependencias de los primeros 20 niveles de energía respecto a la intensidad del campo magnético aplicado, para diferentes valores de la separación entre QDs.

En primer lugar tenemos en la figura 11a el espectro de energía en función de la intensidad del campo magnético para una configuración de un QD circular ($d = 0$). El comportamiento obtenido coincide con la solución exacta reportada en la literatura para un pozo infinito circular

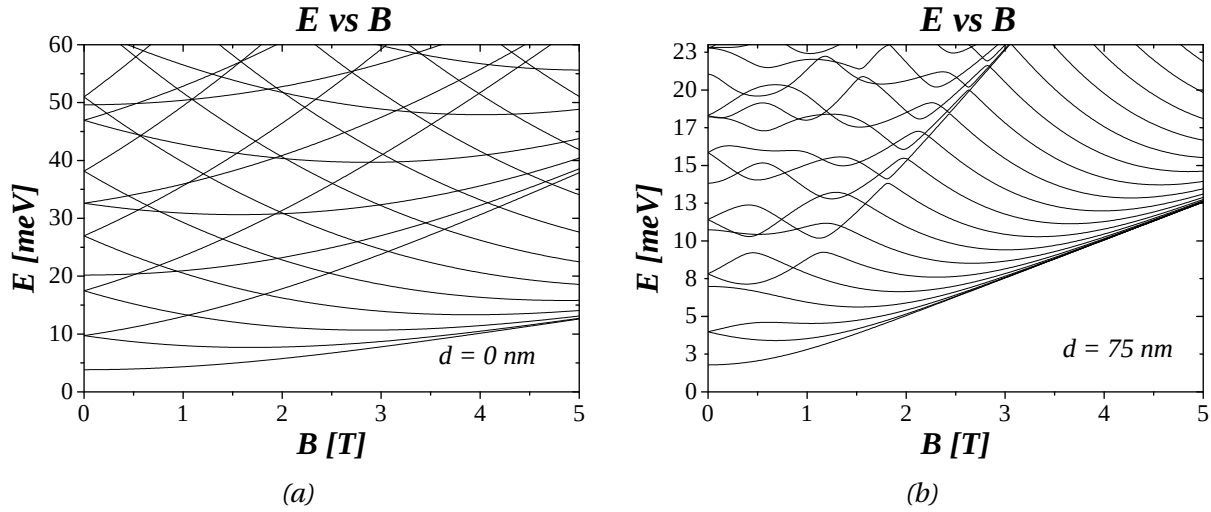


Figura 11: Niveles de energía más bajos como función del campo magnético externo, sin campo eléctrico y una distancia entre puntos de: a) 0 nm b) 75 nm

[Lent, 1991], en cuyo caso los valores de energía para el movimiento radial están relacionados con los ceros de la función de Bessel de orden entero. En este caso se observa el gran número de cruces que se dan entre niveles, producto de la simetría circular de la estructura. Por otra parte la presencia del campo magnético rompe el degeneramiento de los estados doblemente degenerados. De otra parte, en la figura 11b se ha graficado la misma dependencia anterior para el caso de una separación de 75 nm entre QDs. Se puede apreciar una completa transformación del espectro respecto al caso anterior, y se hace evidente como la ruptura de la simetría circular trae consigo la eliminación de un gran número de cruces entre niveles. Además, se dan cambios muy notables en el espectro para el caso en el que el confinamiento magnético es menor o apenas comparable con el confinamiento estructural, lo cual muestra una incidencia importante de la anisotropía estructural sobre los estados electrónicos, en especial, los más bajos. Por otro lado, para valores altos de campo magnético se observa la tendencia de los niveles de energía hacia los niveles de Landau, revelándose así en este caso, el dominio del confinamiento diamagnético.

Conjuntamente resulta interesante considerar la dependencia de las energías respecto de la intensidad de campo magnético para el caso de una TTQDM con agujero central. Las figuras 12a y 12b muestran el espectro de energía para dos estructuras con separaciones entre los centros de los QDs de 87 nm y 95 nm , respectivamente. Para la primera estructura, con $d = 87\text{ nm}$, se tiene que el agujero central, considerándolo como un triángulo equilátero, tiene de lado menos de 1 nm . Sin embargo, a pesar de las pequeñas dimensiones de dicho agujero, los cambios en los niveles de energía ya se hacen notables debido al cambio en la topología. El rasgo que más destaca es la aparición de cruces entre los 3 niveles de energía más bajos, lo cual es señal de que dicha estructura exhibe un comportamiento de anillo cuántico. En el caso de la segunda estructura, con $d = 95\text{ nm}$, se tiene que el agujero central, considerándolo nuevamente como un triángulo equilátero, tiene de lado alrededor de 20 nm . El incremento en el número de cruces de los 3 primeros niveles mostrados en el gráfico 12b pone de manifiesto la existencia de

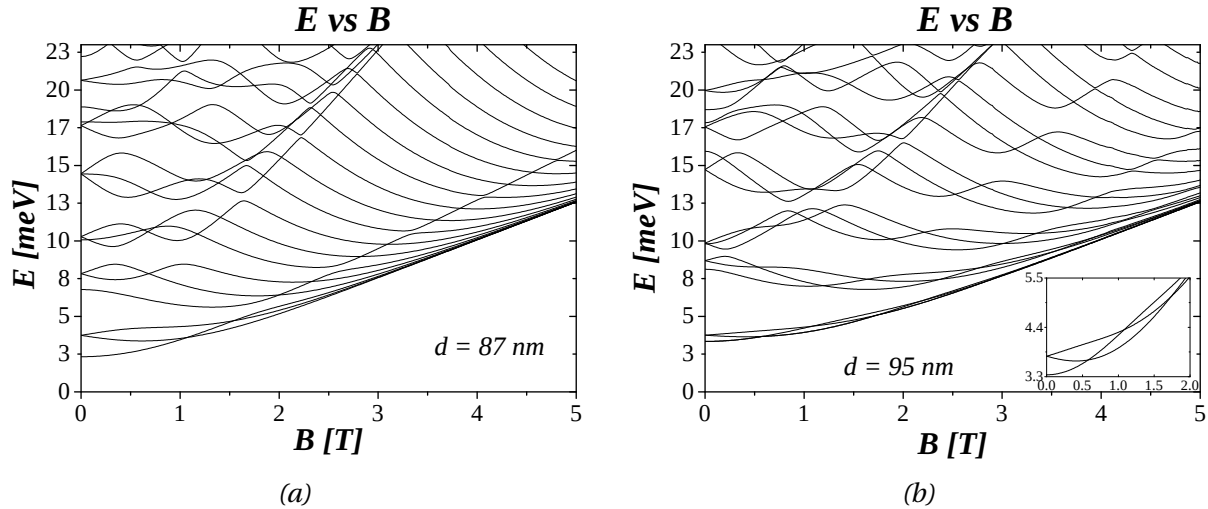


Figura 12: Niveles de energía más bajos como función del campo magnético externo, sin campo eléctrico y una distancia entre puntos de: a) 87 nm b) 95 nm

oscilaciones Aharonov-Bohm en la energía, dado el comportamiento anular más acentuado de esta estructura respecto a la anterior. En este sentido, podemos considerar esta estructura como una cadena cerrada de 3 QDs conectados entre sí o como una molécula de 3 QDs en forma de anillo. Si bien el espectro difiere notablemente del de un anillo circular delgado, lo cual era de esperarse, si puede notarse que se asemeja bastante al caso de un anillo con sección transversal no uniforme, tal como muchos estudios sobre anillos cuánticos lo han demostrado [Rodríguez Prada, 2013, Gutiérrez Niño, 2011]. Como ya se mencionó en la sección 3.1, el alto grado de anisotropía de esta estructura favorece su carácter molecular, lo cual se muestra en la estructura del espectro en grupos de 3 niveles, a manera de trenzas. Este comportamiento tiene lugar debido a marcado confinamiento impuesto por cada uno de los 3 QDs y al acople cuántico existente entre ellos, lo cual permite la formación de estados moleculares enlazantes y antienlazantes.

Volviendo sobre el estado (1,3), del cual hemos mencionado al final de la sección anterior que se trata de un estado oscuro, tenemos ahora que la aplicación del campo magnético tiene la capacidad de destruir el bloqueo que presenta dicho estado y dar lugar a oscilaciones en la corriente, lo cual significa que el flujo magnético que atraviesa el anillo triangular de 3 QDs puede levantar el carácter capturador del estado oscuro en la TTQDM, en este caso solo para algunos valores específicos del campo magnético puede mantenerse el estado oscuro, en cualquier otro caso este se destruye. La oscilación en la corriente surge debido a la acumulación de una diferencia de fase entre diferentes trayectos a través del dispositivo, tal como ha sido predicho por Emary al estudiar el transporte a través de un sistema de tres puntos cuánticos acoplados en un campo magnético perpendicular [Emary, 2007]. Este comportamiento se puede apreciar en la figura 13. Este es un interesante efecto de coherencia cuántica, el cual actualmente ha despertado gran atención para transferir electrones de forma coherente de una localización a otra en un circuito cuántico.

En las figuras 14a y 14b se ha graficado la dependencia de las energías en función de la sepa-

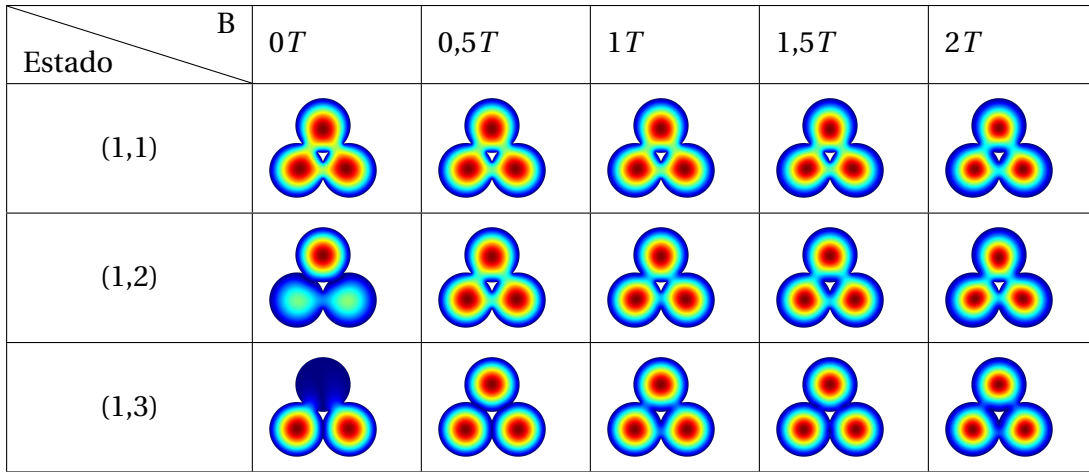


Figura 13: Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración triangular, en presencia de campo magnético, sin campo eléctrico y una distancia entre puntos de 95nm .

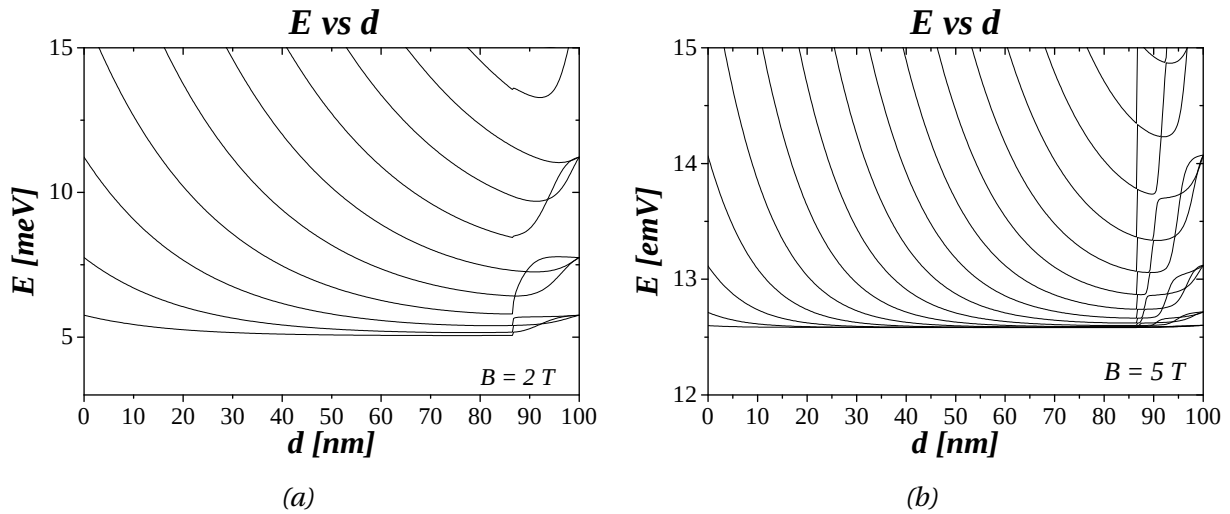


Figura 14: Niveles de energía más bajos como función de la distancia entre los centros de los QDs para la TTQDM, sin campo eléctrico y campo magnético de: a) 2T b) 5T .

ración entre QDs para 2 valores diferentes de campo magnético, 2T y 5T , respectivamente. Se observa una gran diferencia respecto al caso sin campo que se ha mostrado en la figura 9. Se ve como para el caso de una estructura simplemente conexas, los niveles presentan un comportamiento monótono descendente, mientras que al ocurrir el paso a una estructura con hueco central el espectro sufre una notable transformación, apreciándose algunos cambios abruptos en los diferentes niveles. En el gráfico 14a se aprecia cómo, para estructuras sin orificio, los niveles más bajos no presentan cruces, mientras que para niveles superiores comienza a aparecer un mayor número de cruces de forma sucesiva, esto es, para los niveles 5 y 6 aparece un único cruce, mientras que para los tres niveles siguientes aparecen múltiples cruces, y si seguimos ascendiendo, el número de cruces se va incrementando. Este comportamiento está relacionado

con el hecho de que cuanta más energía posee el electrón, entonces el impacto de la anisotropía estructural se hace menor sobre dichos estados electrónicos. En el caso del gráfico 14b no se observa el comportamiento anterior, pues en este caso el confinamiento magnético ($B = 5T$) es dominante. De otra parte, en ambos gráficos se observa como para estructuras que presentan el agujero central si se presentan cruces entre niveles, incluso para los primeros estados, formándose grupos de 3 niveles, lo cual está relacionado con las oscilaciones de Aharonov-Bohm presentes en estructuras anulares. Nuevamente se evidencia cómo las estructuras doblemente conexas (tipo anillo) en la escala de los nanómetros exhiben comportamientos que son cardinalmente diferentes de las estructuras simplemente conexas.

3.1.2. Efecto de campo eléctrico

En esta sección se analiza el efecto de un campo eléctrico uniforme, aplicado en la dirección negativa del eje y y según el sistema de referencia considerado en la figura 6a, sobre el espectro energético del sistema. En la figura 15 se muestran las dependencias de los primeros 20 niveles de energía respecto a la intensidad del campo eléctrico aplicado, para una configuración de TTQDM sin agujero central ($d = 75nm$). En primera instancia se observa la aparición del efecto Stark, es decir, ante la presencia del campo eléctrico se rompe el degeneramiento en los niveles de energía que estaban degenerados. En la medida en que se incrementa la intensidad del campo eléctrico los niveles de energía correspondientes a estados enlazantes decrecen, mientras que para el caso de los estados antienlazantes los correspondientes niveles se incrementan. Dada la morfología y el tamaño de la estructura, estas variaciones resultan suaves para la mayoría de los niveles en el rango de valores de campo considerados. De hecho, el primer nivel, por ser el menos energético, sufre la mayor variación en la energía ante la aplicación del campo. De

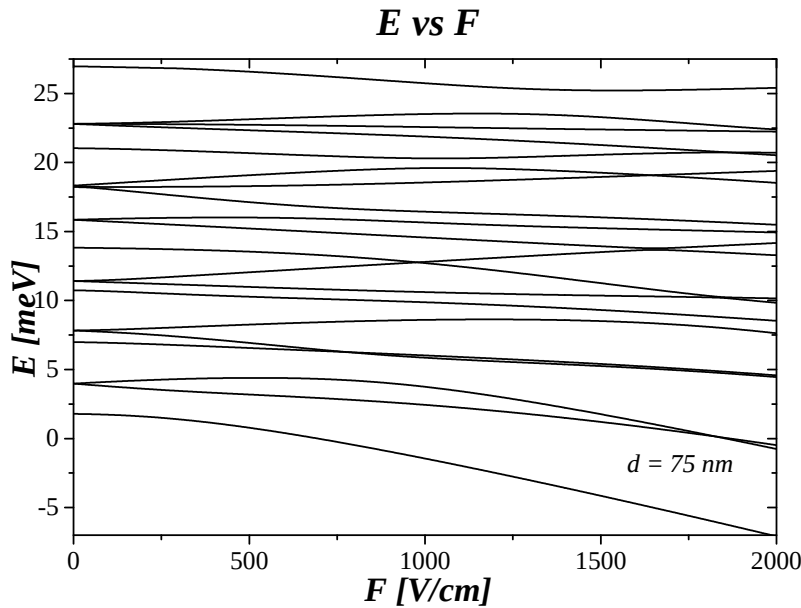


Figura 15: Niveles de energía más bajos como función del campo eléctrico externo para la TTQDM, sin campo magnético y una distancia entre puntos de $75nm$

otra parte, se aprecia la aparición de algunos cruces entre niveles. De acuerdo con el teorema de von Neumann -Wigner, los niveles de energía se cruzan para estados con diferentes simetrías, mientras que no pueden cruzarse si sus estados correspondientes tienen igual simetría. Si consideramos el cruce que se da entre los niveles 2 y 3 para un campo eléctrico de $1,8 [V/cm]$, vemos según los gráficos de la densidad electrónica mostrados en la figura 16 que tiene lugar una conmutación entre dichos estados, los cuales presentan diferentes simetrías, correspondiendo con el mencionado teorema de von Neumann-Wigner.

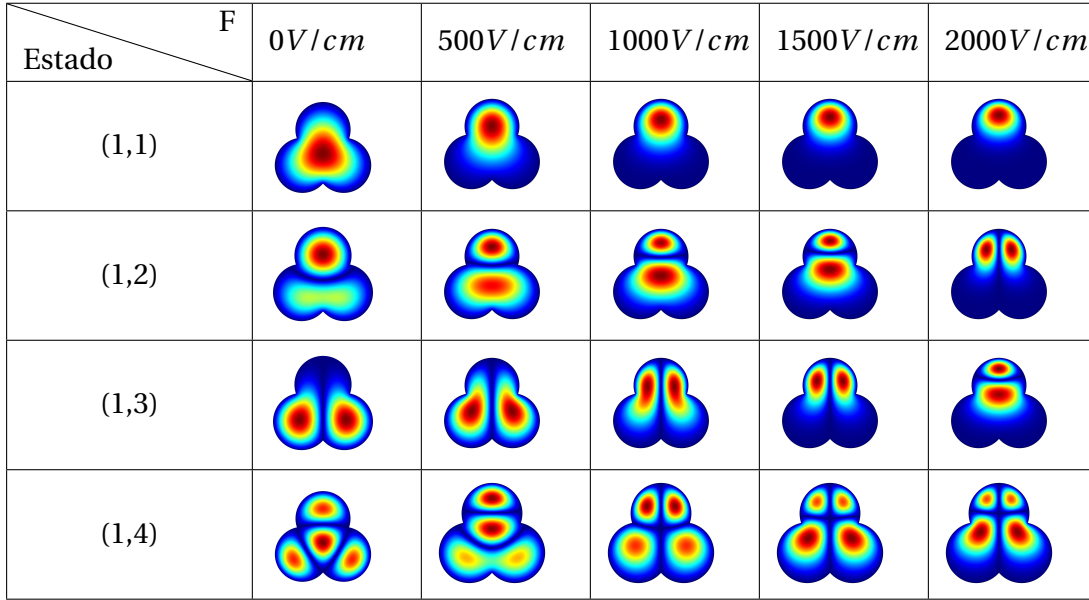


Figura 16: Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración triangular, en presencia de campo eléctrico, sin campo magnético y una distancia entre puntos de $75nm$.

Para analizar el efecto del campo eléctrico sobre el espectro energético de una TTQDM con agujero central ($d = 95nm$) se ha realizado la figura 17. Al comparar estas dependencias con las de la figura 15 se observan claras diferencias. Una primera diferencia es la variación de los niveles de energía con pendientes de mayor valor, lo cual era de esperarse, ya que en este caso la estructura es de mayor tamaño. Otra diferencia es la aparición de un mayor número de cruces entre niveles y la aparición de anticruces, que en el caso anterior no se tenían. De hecho, estos anticruces llevan a que el comportamiento monótono de los niveles implicados no se mantenga, sino que por el contrario se dé un cambio brusco en la pendiente a medida que el campo se incrementa, tal como se observa para el segundo y el tercer estado, donde la pendiente pasa de positiva a negativa alrededor de los $750 [V/cm]$. En este caso el anticruce o repulsión de niveles también está en correspondencia con el teorema de von Neumann-Wigner, tal como se evidencia en las densidades electrónicas de la figura 18, ya que la diferencia en las simetrías de los estados 3 y 4 prohíbe el cruce en sus respectivos niveles de energía, aunque se dé una conmutación entre sus orbitales.

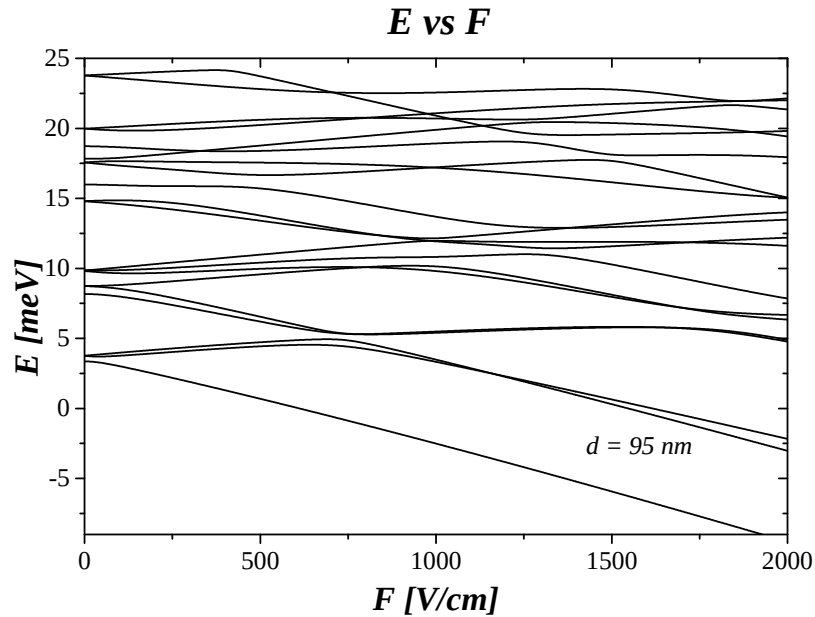


Figura 17: Niveles de energía más bajos como función del campo eléctrico externo para la TTQDM, sin campo magnético y una distancia entre puntos de 95nm .

Estado \ F	0V/cm	500V/cm	1000V/cm	1500V/cm	2000V/cm
(1,1)					
(1,2)					
(1,3)					
(1,4)					

Figura 18: Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración triangular, en presencia de campo eléctrico, sin campo magnético y una distancia entre puntos de 95nm .

3.1.3. Efecto simultáneo de campos magnético y eléctrico

Por último hemos analizado la dependencia del espectro de energía respecto a la intensidad de un campo magnético aplicado en la dirección de crecimiento, pero manteniendo aplicado a la

vez un campo eléctrico de 400 [V/cm] en la dirección negativa del eje y .

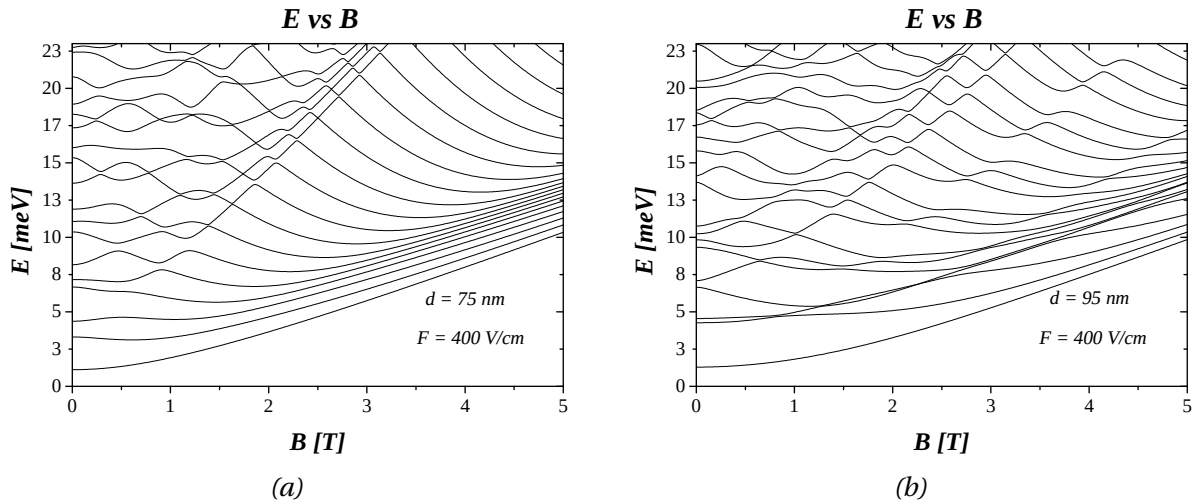


Figura 19: Niveles de energía más bajos como función del campo magnético externo, en presencia de un campo eléctrico externo de 400V/cm. a) $d = 75nm$ b) $d = 95nm$

Los rasgos que más sobresalen, al comparar estos gráficos con los correspondientes al caso sin campo eléctrico (figuras 11b, 12b), son por un lado, la pérdida del carácter molecular en la estructura espectral, ya que los grupos de 3 niveles que se formaban en la estructura sin campo eléctrico desaparecen debido al fuerte confinamiento eléctrico que lleva al electrón a estar localizado casi exclusivamente en el QD1 (superior). Por otro lado se observa en la figura 19b, que para la TTQDM con agujero central ($d = 95nm$) las oscilaciones de Aharonov-Bohm son destruidas para el estado base, y son fuertemente afectadas para niveles superiores, reduciéndose notablemente el número de cruces entre niveles, consecuencia de que el campo eléctrico aplicado evita que el electrón circule a través de los 3 QDs, transformando los estados electrónicos de rotacionales a localizados. Este hecho se constituye por tanto un mecanismo para controlar la corriente que circula por la estructura.

3.2. Molécula lineal

Con el objeto de analizar el efecto del acople cuántico en una estructura de 3 QDs en una configuración diferente a la estudiada en la sección anterior, se considera en esta sección un arreglo lineal de tres QDs circulares de radio 50nm acoplados lateralmente, como se puede observar en el esquema presentado en la figura 6b. Tal estructura puede considerarse como una molécula lineal de tres puntos cuánticos (LTQDM- Linear Triple Quantum Dot Molecule). En primer lugar, al igual que en la molécula triangular se estudió el grado de acoplamiento entre puntos, por lo que se calcularon los primeros niveles energéticos en función de la separación entre QDs, la cual se ha tomado simétricamente, es decir la separación entre el punto 1 y el 2 es igual a la que existe entre el punto 1 y el 3, y se ha denotado dicha separación como el parámetro d . Los resultados de esta dependencia se presentan en la gráfica 20, en ausencia de campos externos. De la

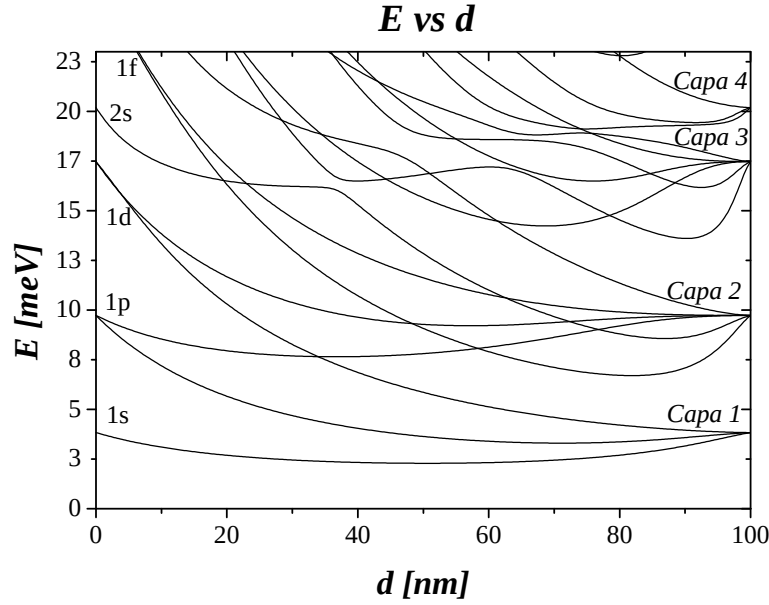


Figura 20: Niveles de energía más bajos como función de la distancia entre los centros de los QDs para la LTQDM, sin campos externos.

misma manera que en el caso triangular (Figura 9) cuando $d = 0$ se obtienen los niveles energéticos de un QD circular y se etiquetaron en la gráfica con la notación de orbitales atómicos. En el caso limite, en el que la separación entre los centros es $d = 2R = 100nm$, los niveles de energía corresponden con los de un solo QD, pero con la novedad de que se encuentran triplemente degenerados, por lo que se adoptó la misma nomenclatura empleada en el caso triangular, en la que dos números (i, k) definen el número de capa y el orden de aparición del orbital dentro de la capa.

En la figura 20 se observa que, en las etapas intermedias de la transformación de la estructura los puntos cuánticos están acoplados electrónicamente y sus orbitales son la combinación de orbitales de puntos cuánticos individuales, formando estados moleculares con carácter enlazante y anti-enlazante. La capa 1 tipo s con la energía más baja, esta constituida por tres estados, como se menciono anteriormente, y estos corresponde a: dos estados enlazantes, el estado base (1,1) y estado (1,2), y uno anti-enlazante, el estado (1,3); las siguientes capas poseen niveles de ambos tipos también, apreciándose que los niveles más bajos de cada una corresponden a estados enlazantes como: (2,1), (2,2), (2,3), (3,1), (3,2) y (3,3), mientras que los estados anti-enlazantes poseen mayor energía dentro de cada capa, como ejemplos se tienen los estados (2,5) y (2,6). Se destaca también la aparición de estados oscuros como en el caso triangular, con la salvedad de que la configuración lineal favorece la formación de un mayor número de estos estados. Lo anterior se pone en evidencia en los gráficos de densidad electrónica de la figura 21, para el caso cuando $d = 95nm$. El estado (1,2) es oscuro y surge de la interferencia destructiva en el QD1 de orbitales s, el cual tiene su análogo en la estructura triangular; de otro lado, también el estado (2,4) es oscuro y se crea por la interferencia de orbitales tipo p, pero este no tiene análogo en el caso triangular. De lo anterior se puede concluir que la simetría juega un

Estado	Distancia				Capa	Estado
	$d = 0nm$	$d = 50nm$	$d = 75nm$	$d = 95nm$		
1s					1	(1,1)
1p					1	(1,2)
1p					1	(1,3)
1d					2	(2,1)
1d					2	(2,2)
2s					2	(2,3)
1f					2	(2,4)
1f					2	(2,5)
2p					2	(2,6)
2p					3	(3,1)
1g					3	(3,2)
1g					3	(3,3)

Figura 21: Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración lineal, sin campos externos.

papel importante en la formación de estados oscuros en sistemas de QDs acoplados lateralmente. Por otra parte se observa también como la simetría C_2 de esta configuración rompe el degeneramiento de todos los niveles que se encontraban degenerados en el caso de un único QD circular, lo cual no ocurrió para el arreglo triangular con simetría C_3 .

3.2.1. Efecto de campo eléctrico

A continuación se analiza el efecto de un campo eléctrico uniforme, el cual se aplicó en la dirección positiva del eje x (de acuerdo al sistema de referencia presentado en la figura 6b), dado que en esta dirección, por la configuración lineal, se logra un mayor efecto en la redistribución de la densidad electrónica por el campo eléctrico. Como primer caso se calcularon los primeros

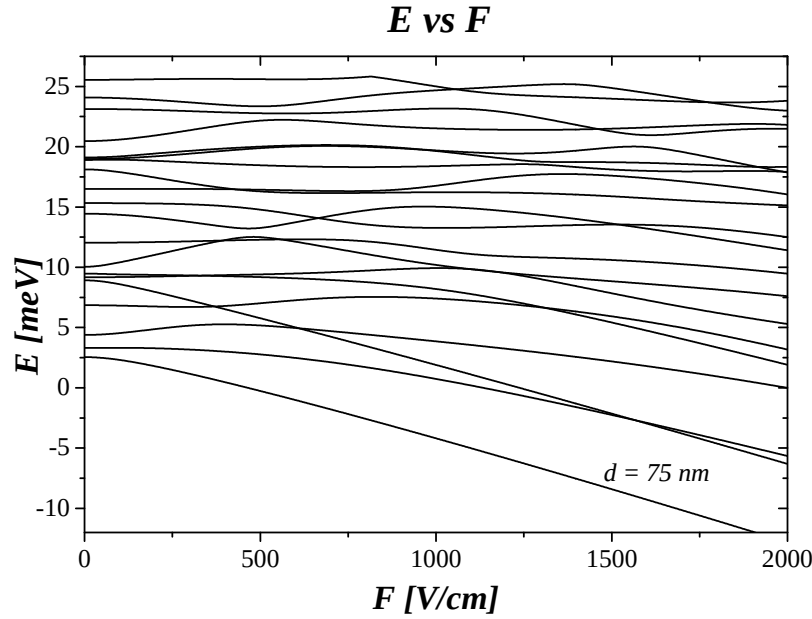


Figura 22: Niveles de energía más bajos como función del campo eléctrico externo para la LTQDM, sin campo magnético y una distancia entre puntos de 75nm .

niveles de energía en función del campo eléctrico externo, sin campo magnético y una separación $d = 75\text{nm}$, los resultados se presentan en la figura 22, además en la figura 23 se muestra la densidad electrónica para los tres primeros niveles y 5 valores distintos campo eléctrico. Se observa que los primeros niveles sufren un decaimiento notable en su energía, tomando valores negativos, a medida que el campo eléctrico se hace más intenso. Además se aprecian cruces y anticruces entre niveles, en mayor número que en el caso triangular debido a que esta configuración se comporta de manera similar a un sistema de 3 pozos de potencial idénticos, localizados en la dirección del campo eléctrico, entre los cuales el electrón puede tunelar en la medida que participa de estados de mayor energía. Un caso particular que se aprecia en las dos figuras es el cruce de los niveles (1,2) y (1,3) alrededor de 1560 [V/cm] , en este punto los estados sufren una conmutación. Por ultimo, las gráficas de densidad electrónica para los primeros niveles permiten evidenciar como el campo eléctrico aumenta la probabilidad del electrón de localizarse en el QD de la izquierda, logrando con intensidades altas reducir casi a cero la probabilidad de encontrarse en los otros dos puntos cuánticos.

La figura 24 presenta la misma dependencia anterior pero para una separación $d = 95\text{nm}$, al comparar el comportamiento de los niveles con el caso lineal con separación $d = 75\text{nm}$ (Figura 22) se aprecia un decrecimiento más pronunciado en los niveles de energía más bajos y se observan un mayor número de cruces y anticruces entre niveles, dado que la estructura es de mayor tamaño. En la figura 25 se muestran las densidades de probabilidad de los primeros niveles para diferentes valores de campo eléctrico, se observa que en el estado base de los diferentes campos eléctricos el electrón se encuentra prácticamente localizado en el QD2 (el de la izquierda), y en los siguientes niveles la probabilidad se desplaza notablemente a medida que

el campo se hace más intenso.

Campo eléctrico V/cm	Estado		
	(1,1)	(1,2)	(1,3)
0			
500			
1000			
1500			
2000			

Figura 23: Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración lineal, en presencia de diferentes campos eléctricos, sin campo magnético externo y una distancia fija entre puntos de $75nm$.

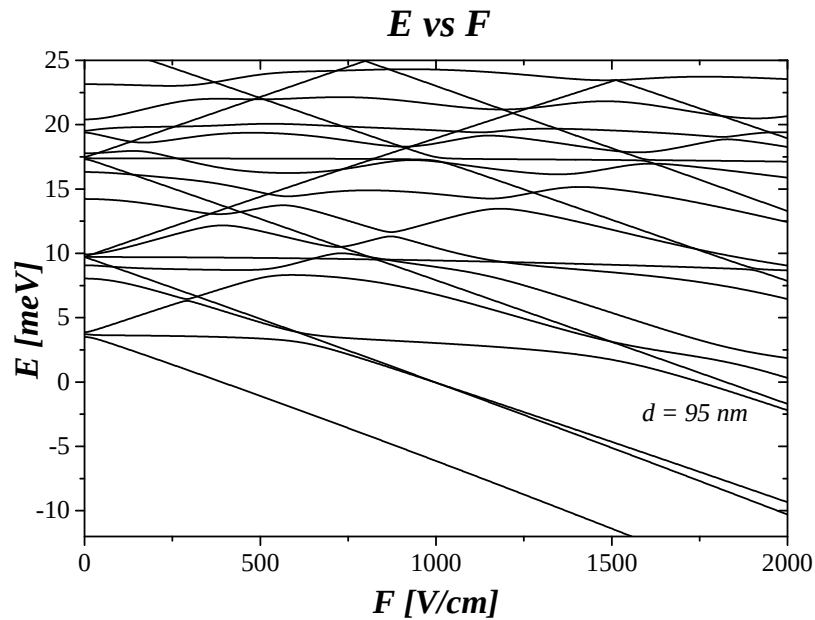


Figura 24: Niveles de energía más bajos como función del campo eléctrico externo para la LTQDM, sin campo magnético y una distancia entre puntos de $95nm$.

Campo eléctrico V/cm	Estado		
	(1,1)	(1,2)	(1,3)
0			
500			
1000			
1500			
2000			

Figura 25: Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos en configuración lineal, en presencia de diferentes campos eléctricos, sin campo magnético externo y una distancia fija entre puntos de $95nm$.

3.2.2. Efecto de campo magnético

Para la LTQDM se estudio también el efecto que produce la aplicación de un campo magnético externo en la dirección de crecimiento, sobre los niveles de energía del electrón confinado. En la figura 26 se presentan los primeros 20 niveles energéticos en función del campo magnético, sin campo eléctrico externo y una separación entre centros de $95nm$. Se observa un agrupa-

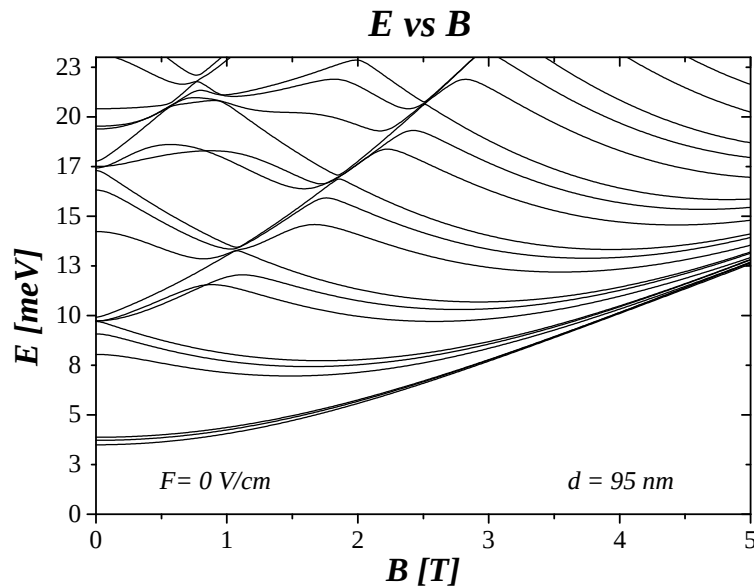


Figura 26: Niveles de energía más bajos como función del campo magnético externo para la LTQDM, sin campo eléctrico y una distancia entre puntos de $95nm$.

miento de los niveles en paquetes de tres, mostrando un carácter plenamente molecular en la estructura espectral, esto debido a que el confinamiento estructural impuesto sobre el electrón se puede ver como 3 pozos de potencial acoplados. En el rango de campo magnético bajo, es decir desde $0T$ hasta $2T$, se aprecia que unos conjuntos presentan comportamiento creciente y otros decreciente, debido al dominio paramagnético. A medida que el campo se hace intenso, la brecha entre los grupos de niveles se hace menor, y estos tienden hacia los niveles de Landau, evidenciando en este caso un dominio del confinamiento diamagnético. Dado que la estructura lineal posee un menor número de ejes de simetría y no posee un agujero en su centro, hay notables diferencias con el caso triangular con la misma separación entre puntos, presentado en la figura 12b, las cuales son que no se presentan oscilaciones en los primeros niveles de energía y se disminuyen el número de cruces entre niveles en las regiones de campo magnético bajo, porque la estructura vuelve a ser simplemente conexas.

3.2.3. Efecto simultáneo de campos magnético y eléctrico

Para finalizar el caso de la molécula lineal se presenta el análisis de la variación de la energía ante la presencia simultanea de campos eléctricos y magnéticos. Los campos eléctrico y magnético se aplicaron en las mismas direcciones de los casos presentados anteriormente (eléctrico en la dirección positiva del eje x y magnético en la de crecimiento). Primero, se analiza el efecto sobre los niveles de energía al variar el campo eléctrico aplicado mientras se mantiene constante un campo magnético de $2T$; luego se estudia el comportamiento de la energía en función del campo magnético, con el campo eléctrico constante.

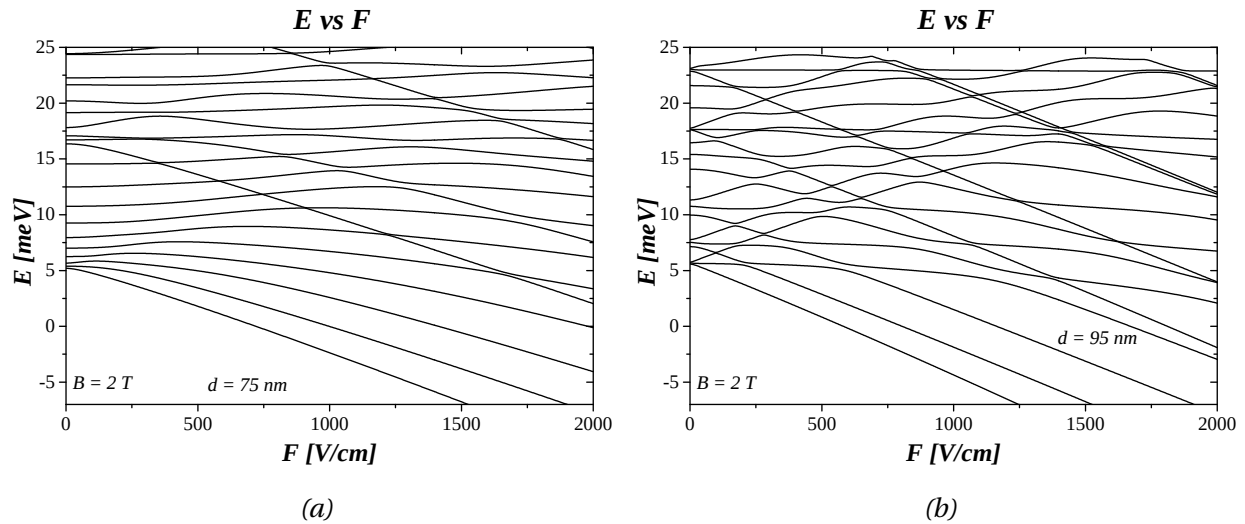


Figura 27: Niveles de energía más bajos como función del campo eléctrico externo para la LTQDM, con campo magnético de $2T$ y una distancia entre puntos de: a) $75nm$ b) $95nm$

El primer caso se muestra en la figura 27, y se han considerando dos valores del parámetro d . Las curvas de energía de 27a, correspondientes a $d = 75nm$ exhiben diferencias notables para los niveles más bajos, respecto al mismo caso sin campo magnético (figura 22), ya que dichos

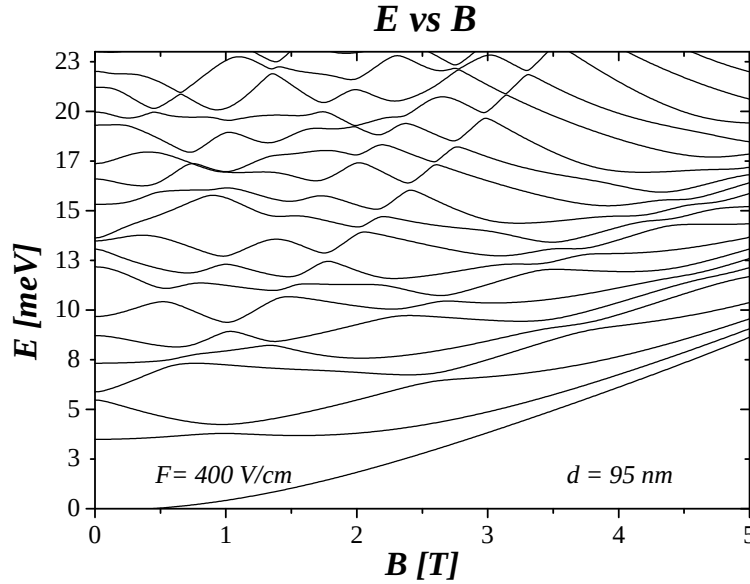


Figura 28: Niveles de energía más bajos como función del campo magnético externo para la LTQDM, con campo eléctrico externo de 400 V/cm y una distancia entre puntos de 95 nm .

niveles no presentan cruces ni anticruces, y además, para campos eléctricos de baja intensidad, las energías correspondientes a los estados del 6 al 10 son casi invariantes ante el campo eléctrico, lo cual muestra el carácter dominante del confinamiento magnético en los niveles menos energéticos. Los niveles de energía para $d = 95\text{ nm}$ se muestran en la figura 27b, y se puede apreciar como en este caso el efecto del campo eléctrico sobre las energías, respecto a la situación sin campo magnético (figura 24), es casi el mismo, por lo que se puede establecer que debido al mayor tamaño de la estructura, en este caso, el confinamiento eléctrico se hace dominante frente al magnético.

En la figura 28 se exhiben los niveles de energía para la segunda combinación de campos planteada anteriormente, es decir, variando el magnético y manteniendo un eléctrico constante de 400 V/cm , para una distancia de 95 nm . Se observa como la presencia del campo eléctrico rompe la simetría del sistema y desacopla los grupos de 3 niveles, observados en la figura 26 (correspondiente a la energía en función del campo magnético para la misma configuración, pero sin campo eléctrico), hace desaparecer los cruces entre niveles y da lugar a la aparición de anticruces. También se aprecia que con el aumento del campo magnético, el confinamiento diamagnético se hace fuerte y propicia una tendencia no tan marcada hacia los niveles de Landau. De otra parte los niveles más bajos cambian de una manera más suave, respecto al caso sin campo eléctrico, dado el fuerte efecto localizador que tiene el confinamiento eléctrico.

3.3. Transformación topológica

En la presente sección se muestran los resultados obtenidos para la transformación estructural a la que fue sometido el sistema, que consistió en variar paulatinamente la configuración de los

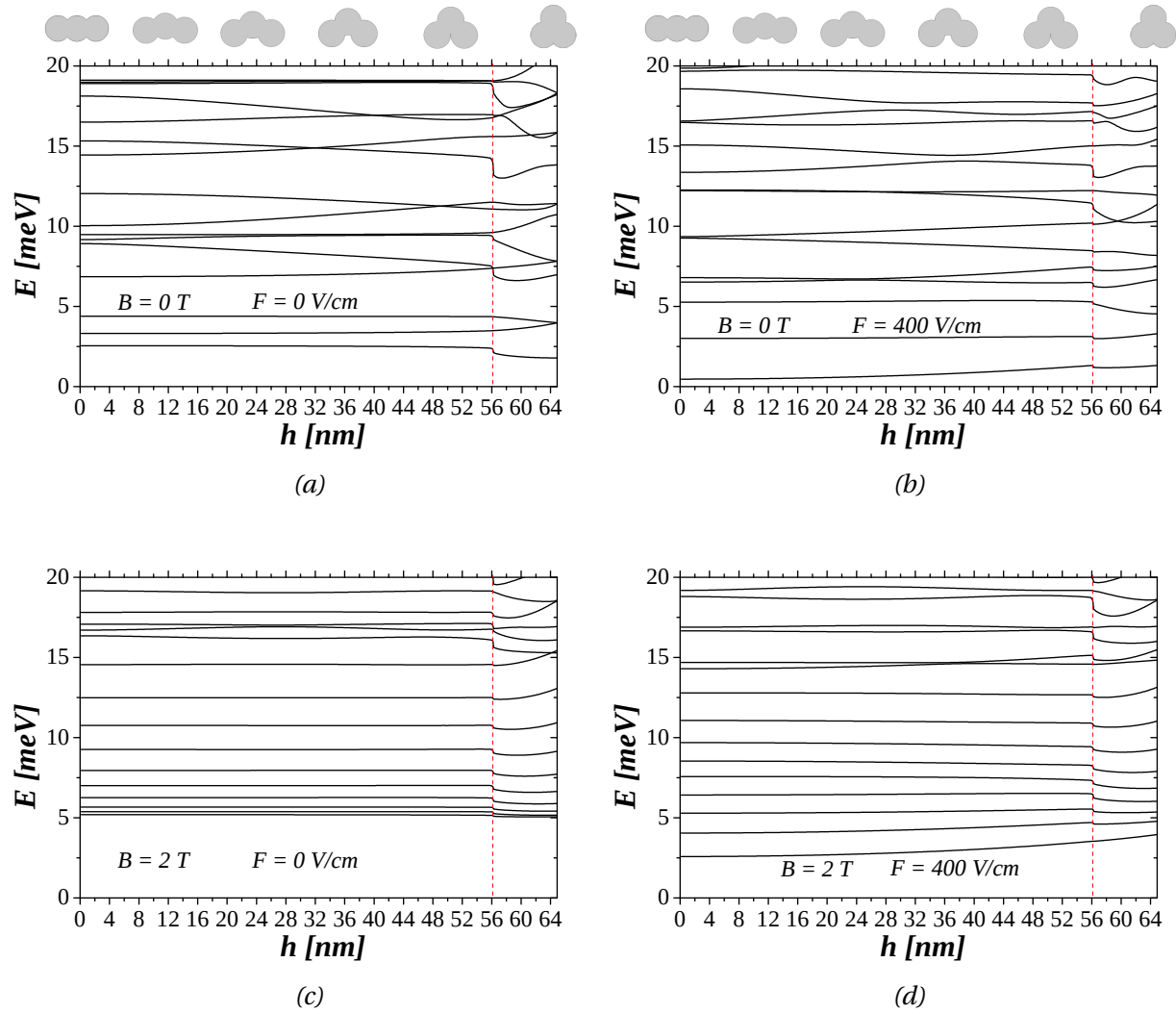


Figura 29: Niveles de energía más bajos como función del parámetro de forma variable h , distancia entre los centros de los QDs de 75nm y diferentes campos externos.

tres puntos cuánticos, teniendo como puntos extremos los casos lineal y triangular. Para lograr esta transición se vario el parámetro de forma h , el cuál es la altura del triangulo formado por los centros de los tres QDs, tal y como se describió en la sección 2.1. En la figura 29 se presenta el comportamiento de los primeros niveles de energía como función de h para una separación entre centros de 75nm , para cuatro combinaciones de campos eléctricos y magnéticos. La figura 29a muestra el caso en que ambos campos son cero, y la figura 30 presenta los gráficos de densidad de probabilidad electrónica para los correspondientes cinco primeros estados. Se evidencia en ambas gráficas como los niveles de energía pasan de ser los observados en el caso lineal (figura 21) a los de la molécula triangular (figura 10), pero en las etapas intermedias se presentan cruces entre niveles debido al cambio que se va dando en la simetría de la estructura. Una característica muy interesante de la transformación es que algunos niveles presentan un descenso abrupto en su energía cuando el parámetro h se acerca a los 56nm , pues a partir de este punto los dos QDs de los extremos (QD2 Y QD3) entran en contacto y por ende el confina-

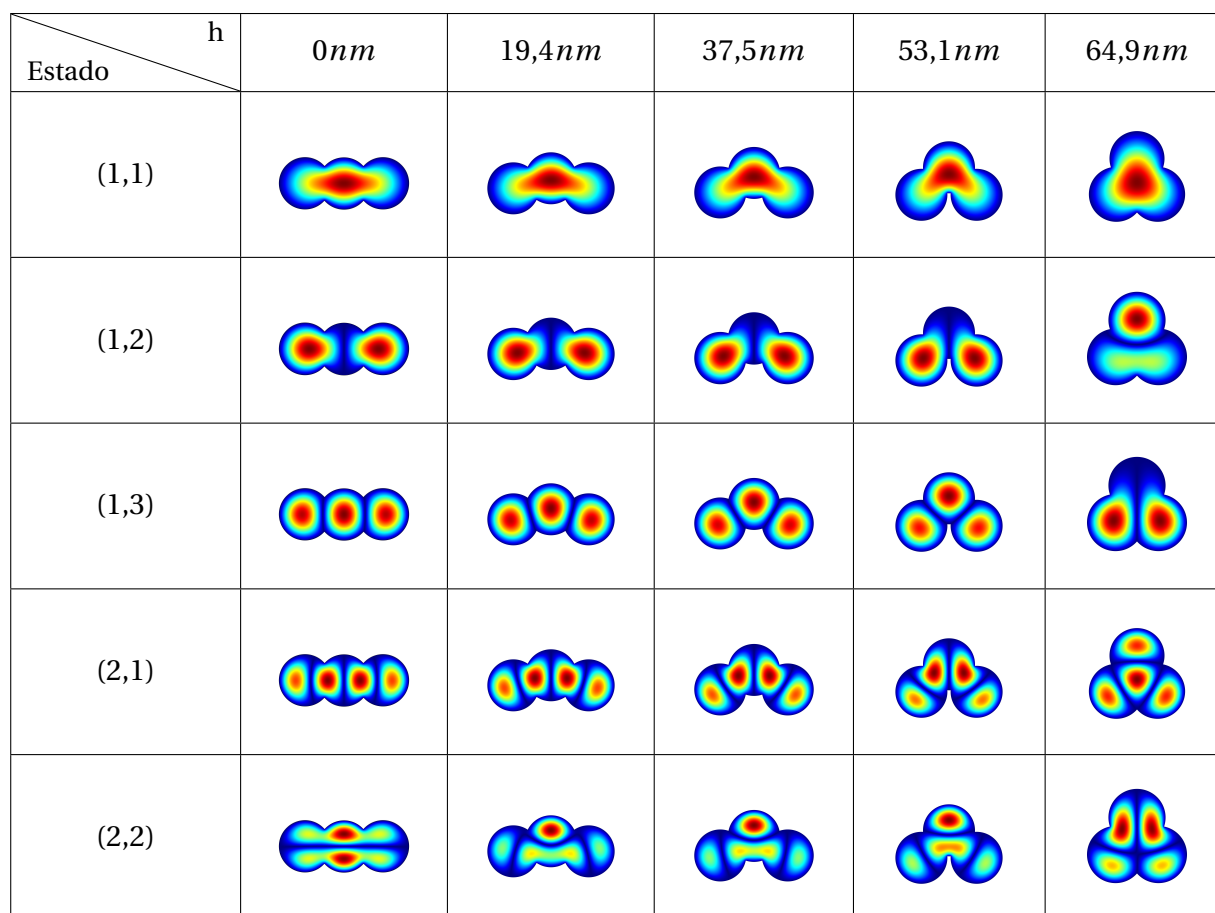


Figura 30: Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos sometida a una transformación topológica desde una configuración lineal a una triangular, con una distancia entre los centros de los QDs de $75nm$

miento se reduce, ya que la estructura pasa de ser una cadena a ser una estructura con acople entre todos los pares de QDs. Por otro lado en la figura 30 se muestran los gráficos de densidad de probabilidad para los cinco primeros estados en cinco valores distintos del parámetro h , se aprecia que no hay cambios abruptos en el comportamiento del electrón al aumentar la altura, salvo cuando se tiene cruces entre niveles debido a los cambios de simetría que se van dando.

La figura 29b muestra el resultado de realizar la transformación en presencia de un campo eléctrico de $400V/cm$ orientado en dirección $+x$. Se observa que la energía de los estados bajos disminuye en relación al caso sin campos, esto debido al potencial eléctrico. Un fenómeno interesante se presenta con los niveles 10 y 11, pues en la figura 29a se podía apreciar un cruce entre ellos, pero en con el campo eléctrico este comportamiento se cambia y se da un anticruce. Se observa que el campo eléctrico destruye el agrupamiento de los niveles en la estructura triangular final. Por otro lado, la figura 29c exhibe el comportamiento de los niveles a medida que se realiza la transformación, pero en presencia de un campo magnético en la dirección de crecimiento y sin campo eléctrico. Se observa que el campo magnético eleva la energía de los

niveles, y hace casi invariantes las energías ante la transformación geométrica de la estructura, lo cual indica el fuerte efecto que tiene el confinamiento magnético. Por ultimo, en la figura 29d se presenta el comportamiento de la energía con la aplicación de los dos campos, en las mismas direcciones de los casos anteriores, se aprecia que el campo eléctrico disminuye la energía de los estados más bajos y hace que el efecto del cambio topológico alrededor de los $56nm$ sea menor, pues el efecto de los campos es mayor. Cabe también resaltar que, aunque el campo eléctrico en las figuras 29b y 29d, hace que la energía de los estados más bajos sea menor que en los otros casos, sin campo (29a) y con solo campo magnético (29c), a medida que el parámetro h aumenta la energía de estos niveles aumenta, esto debido a que por el cambio topológico, de línea a triángulo, el efecto del campo eléctrico en dirección $+x$ se disminuye.

Por ultimo, se analiza el comportamiento de los niveles de energía a medida que la estructura se transforma de una molécula lineal a una triangular para el caso de $d = 95$, con las mismas

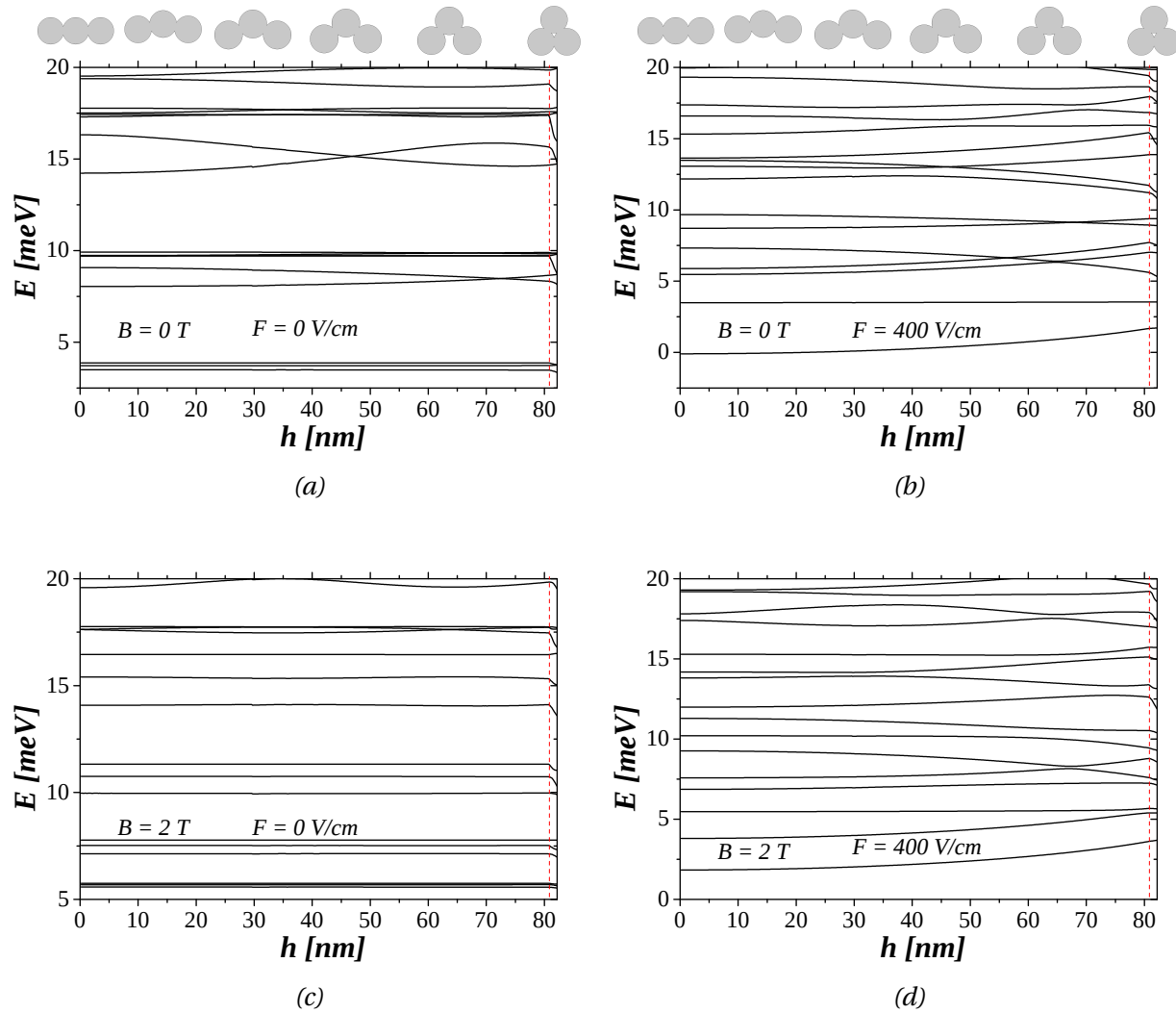


Figura 31: Niveles de energía más bajos como función del parámetro de forma variable h , distancia entre los centros de los QDs de $95nm$ y diferentes campos externos.

combinaciones de campos externos aplicados en el caso anterior, y los resultados se muestran en las figuras 31. Para esta configuración, el parámetro h puede tomar valores más grandes, alcanzando un valor máximo de aproximadamente $82,27nm$. Cuando no se aplican campos externos, figura 31a, los niveles de energía presentan un agrupamiento, en concordancia con la formación de capas, que se observo en los casos triangular y lineal al variar la separación entre los centros de los QDs (Figuras 9 y 20). Adicionalmente, se presentan algunos cruces en los niveles dentro de los grupos, y algunos de estos niveles sufren una disminución apreciable en su energía cuando el parámetro h se acerca a los $80,8nm$, punto en el cual entran en contacto los QDs de los extremos y tiene lugar un salto en la geometría de la estructura de simplemente conexa a doblemente conexa, pues aparece un agujero al interior del sistema. En la figura 32 se presentan las densidades de probabilidad electrónicas para los cinco primeros niveles en cinco valores del parámetro h . Resulta interesante el cambio que se observa en los estados 4 y 5 cuando h se hace mayor: en el primero estado mencionado la probabilidad electrónica se aumenta en los contactos entre QDs, pero cuando se forma la estructura con hueco central aparece una corriente alrededor del centro; en el segundo, se aprecia que en la estructura lineal, la probabi-

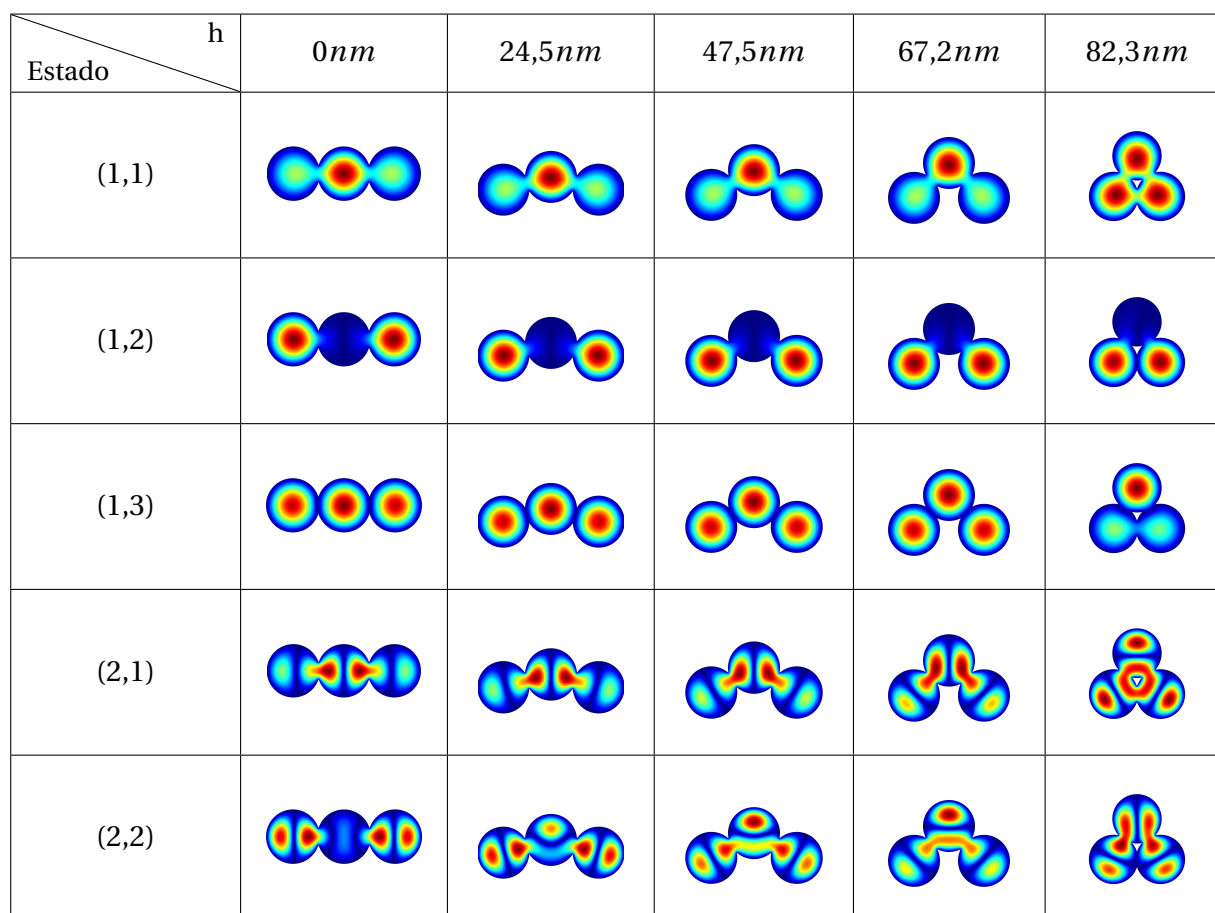


Figura 32: Gráficos de densidad electrónica de un electrón en una molécula de tres QDs idénticos sometida a una transformación topológica desde una configuración lineal a una triangular, con una distancia entre los centros de los QDs de $95nm$.

lidad electrónica se encontraba en los QDs extremos, y a medida que se forma el triángulo se desplaza hacia los contactos.

La aplicación de un campo eléctrico externo de $400V/cm$, destruye el agrupamiento entre niveles, disminuye la energía de los estados más bajos, y produce la aparición de cruces entre niveles, como se puede apreciar en la figura 31b. La figura 31c muestra los niveles de energía para cuando se realiza la transformación en presencia de solamente campo magnético, de magnitud $2T$. Se observa un incremento en las energías debido al confinamiento adicional que proporciona el campo magnético y además los niveles se hacen menos sensibles a la transformación, muestra de que el confinamiento magnético se hace dominante. Finalmente, en la figura 31d se muestran las curvas de energía para el caso en el que se aplican simultáneamente los campos eléctrico de $400V/cm$ y magnético de $2T$, evidenciando nuevamente la desaparición de los grupos de niveles y la disminución de energía, debido al campo eléctrico.

4. Conclusiones

Habiendo finalizado el presente trabajo de investigación se pueden establecer las siguientes conclusiones:

El método empleado para llevar a cabo la solución numérica de la ecuación de Schrödinger del sistema fue el de elementos finitos, y su validez para solucionar ecuaciones de este tipo se constató al comparar los resultados presentados en la literatura para un punto cuántico circular en presencia de campo magnético con los del caso en el que la distancia de separación entre los centros de los tres QDs del sistema era cero en presencia de magnético. Los niveles de energía cotejados tenían concordancia.

Se demostró que un sistema de tres puntos cuánticos acoplados lateralmente exhibe un espectro energético de tipo molecular, con una estructura por capas constituidas con tres veces el número de niveles que corresponden a un único QD, evidenciándose además el carácter enlazante y antienlazante de los diferentes estados. La estructura espectral de estas estructuras corresponde con la de un sistema cuántico de tres niveles los cuales gozan actualmente de gran interés por su potencial para aplicaciones en óptica y computación cuántica.

El análisis de las dos configuraciones geométricas del sistema de tres QDs, junto con el de la transformación topológica realizada, puso en evidencia que la configuración estructural es un factor de peso en la estructura espectral que muestra este tipo de sistemas.

Los cálculos realizados en función de campos eléctricos y magnéticos externos aplicados, permitieron evidenciar como el efecto de estos campos sobre las propiedades electrónicas depende fuertemente de la configuración de la estructura. Para el caso de la molécula triangular en presencia de un campo magnético se encontraron oscilaciones de Aharonov-Bohm en las energías, incluso para los niveles más bajos, y se demostró como un campo eléctrico orientado con el plano de la estructura puede producir un efecto localizador tan fuerte que extinga dichas oscilaciones. Para el caso de la molécula lineal se encontró que dicha configuración es altamente sensible a la presencia de campos eléctricos aplicados en dirección del eje de simetría.

Los resultados mostraron la formación de estados oscuros en sistemas de tres QDs acoplados lateralmente y pusieron de manifiesto que la configuración geométrica y su simetría puede favorecer o inhibir la aparición de estos estados.

Referencias Bibliográficas

- [Aharon et al., 2016] Aharon, E., Pozner, R., Lifshitz, E., and Peskin, U. (2016). Multi-bit dark state memory: Double quantum dot as an electronic quantum memory. *Journal of Applied Physics*, 120(24):244301.
- [Ahn, 2014] Ahn, J. S. (2014). Finite difference method for the arbitrary potential in two dimensions: Application to double/triple quantum dots. *Superlattices and Microstructures*, 65:113–123.
- [Atkins and Friedman, 2011] Atkins, P. and Friedman, R. (2011). *Molecular Quantum Mechanics*. OUP Oxford.
- [Barticevic et al., 2009] Barticevic, Z., Pacheco, M., Duque, C., and Oliveira, L. (2009). A theoretical study of exciton energy levels in laterally coupled quantum dots. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 21(40):405801.
- [Baruffa et al., 2010] Baruffa, F., Stano, P., and Fabian, J. (2010). Theory of anisotropic exchange in laterally coupled quantum dots. *Physical review letters*, 104(12):126401.
- [Bimberg et al., 1999] Bimberg, D., Grundmann, M., and Ledentsov, N. (1999). *Quantum Dot Heterostructures*. Wiley.
- [Boonpeng et al., 2009] Boonpeng, P., Jevasuwan, W., Suraprapapich, S., Ratanathamaphan, S., and Panyakeow, S. (2009). Quadra-quantum dots grown on quantum rings having square-shaped holes: Basic nanostructure for quantum dot cellular automata application. *Microelectronic Engineering*, 86(4):853–856.
- [Bransden and Joachain, 2000] Bransden, B. and Joachain, C. (2000). *Quantum Mechanics*. Prentice Hall.
- [Cartmell and Fowles, 2013] Cartmell, E. and Fowles, G. (2013). *Valency and Molecular Structure*. Elsevier Science.
- [Cha and Chung, 2002] Cha, M. C. and Chung, M. H. (2002). Single-electron energy levels of a parallel double-quantum dot.
- [Chwiej and Szafran, 2008] Chwiej, T. and Szafran, B. (2008). Few-electron artificial molecules formed by laterally coupled quantum rings. *Physical Review B*, 78(24):245306.
- [Climente and Planelles, 2008] Climente, J. and Planelles, J. (2008). Characteristic molecular properties of one-electron double quantum rings under magnetic fields. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 20(3):035212.
- [COMSOL Inc., a] COMSOL Inc. Comsol multiphysics[®] the platform for physics-based modeling and simulation. En línea. URL: <https://www.comsol.com/comsol-multiphysics>.

- [COMSOL Inc., b] COMSOL Inc. The finite element method (fem). En Línea. URL: <https://www.comsol.com/multiphysics/finite-element-method>.
- [COMSOL Inc., 2015] COMSOL Inc. (2015). *COMSOL Multiphysics Reference Manual 5.2*.
- [Corredor and Gutiérrez, 2014] Corredor, C. T. and Gutiérrez, W. (2014). Molecular states of laterally coupled quantum dots under electric fields. *Revista Facultad de Ingeniería Universidad de Antioquia*, (71):17–24.
- [Dupas and Lahmani, 2007] Dupas, C. and Lahmani, M. (2007). *Nanoscience: Nanotechnologies and Nanophysics*. Springer Berlin Heidelberg.
- [Eisele et al., 2008] Eisele, H., Lenz, A., Heitz, R., Timm, R., Dähne, M., Temko, Y., Suzuki, T., and Jacobi, K. (2008). Change of InAs/GaAs quantum dot shape and composition during capping. *Journal of Applied Physics*, 104(12):124301.
- [Emary, 2007] Emary, C. (2007). Dark states in the magnetotransport through triple quantum dots. *Physical Review B*, 76(24):245319.
- [Esaki and Tsu, 1970] Esaki, L. and Tsu, R. (1970). Superlattice and negative differential conductivity in semiconductors. *IBM J RES DEVELOP*, 14(1):61–65.
- [Fölsch et al., 2014] Fölsch, S., Martínez-Blanco, J., Yang, J., Kanisawa, K., and Erwin, S. C. (2014). Quantum dots with single-atom precision. *Nature nanotechnology*, 9(7):505–508.
- [García Russi, 2007] García Russi, L. F. (2007). *Aproximación adiabática para sistemas de dos partículas en puntos cuánticos autoensamblados*. PhD thesis, Universidad Industrial de Santander.
- [Gutiérrez Niño, 2011] Gutiérrez Niño, W. (2011). *Estados ligados de portadores de carga en heteroestructuras semiconductoras*. PhD thesis, Universidad Industrial de Santander.
- [Harrison, 2011] Harrison, P. (2011). *Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures*. Wiley.
- [Henini, 2011] Henini, M. (2011). *Handbook of Self Assembled Semiconductor Nanostructures for Novel Devices in Photonics and Electronics*. Elsevier Science.
- [Hsieh et al., 2012] Hsieh, C.-Y., Shim, Y.-P., Korkusinski, M., and Hawrylak, P. (2012). Physics of lateral triple quantum-dot molecules with controlled electron numbers. *Reports on Progress in Physics*, 75(11):114501.
- [Jacak et al., 2012] Jacak, L., Hawrylak, P., and Wojs, A. (2012). *Quantum Dots*. NanoScience and Technology. Springer Berlin Heidelberg.
- [Johnson, 2009] Johnson, C. (2009). *Numerical Solution of Partial Differential Equations by the Finite Element Method (Dover Books on Mathematics)*. Dover Publications.

- [Kanjanchuchai et al., 2009] Kanjanchuchai, S., Maitreeboriraks, M., Thet, C., Limwongse, T., and Panyakeow, S. (2009). Self-assembled InAs quantum dots on cross-hatch InGaAs templates: Excess growth, growth rate, capping and preferential alignment. *Microelectronic Engineering*, 86(4):844–849.
- [Klimov et al., 2000] Klimov, V., Mikhailovsky, A., Xu, S., Malko, A., Hollingsworth, J., Leatherdale, C., Eisler, H.-J., and Bawendi, M. (2000). Optical gain and stimulated emission in nanocrystal quantum dots. *Science*, 290(5490):314–317.
- [Korkusinski et al., 2007] Korkusinski, M., Gimenez, I. P., Hawrylak, P., Gaudreau, L., Studenikin, S. A., and Sachrajda, A. S. (2007). Topological Hund's rules and the electronic properties of a triple lateral quantum dot molecule. *Physical Review B*, 75(11):115301.
- [Lent, 1991] Lent, C. S. (1991). Edge states in a circular quantum dot. *Physical Review B*, 43(5):4179–4186.
- [Levinshtein et al., 1996] Levinshtein, M., Rumyantsev, S., and Shur, M. (1996). *Handbook Series on Semiconductor Parameters: In 2 Volumes*.
- [Logg et al., 2012] Logg, A., Mardal, K., and Wells, G. (2012). *Automated Solution of Differential Equations by the Finite Element Method: The FEniCS Book*. Lecture Notes in Computational Science and Engineering. Springer Berlin Heidelberg.
- [Londoño et al., 2015] Londoño, M., Rúa, J., Giraldo-Gómez, J., Montegranario, H., Mora-Ramos, M., and Duque, C. (2015). A meshless scheme for the calculation of electron and hole states in laterally coupled GaAs–GaInAs quantum dots under applied electric field. *Superlattices and Microstructures*, 87:77–82.
- [López López and Méndez García, 2008] López López, M. and Méndez García, V. H. (2008). Autoensamblado de puntos cuánticos semiconductores. *Cinvestav*.
- [Lutsikii, 1970] Lutsikii, V. (1970). Quantum size effect—present state and perspectives of experimental investigations. *physica status solidi (a)*, 1(2):199–220.
- [Marín, 2008] Marín, J. H. (2008). *Espectro energético de sistemas de pocas partículas fuertemente confinadas en heterojunturas semiconductoras*. PhD thesis, Universidad Industrial de Santander.
- [Michaelis et al., 2006] Michaelis, B., Emary, C., and Beenakker, C. (2006). All-electronic coherent population trapping in quantum dots. *EPL (Europhysics Letters)*, 73(5):677.
- [Michler et al., 2000] Michler, P., Kiraz, A., Becher, C., Schoenfeld, W., Petroff, P., Zhang, L., Hu, E., and Imamoglu, A. (2000). A quantum dot single-photon turnstile device. *Science*, 290(5500):2282–2285.
- [Mikhailov et al., 2005] Mikhailov, I., Marín, J., and García, F. (2005). Off-axis donors in quasi-two-dimensional quantum dots with cylindrical symmetry. *physica status solidi (b)*, 242(8):1636–1649.

- [Muñoz et al., 2003] Muñoz, E., Barticevic, Z., and Pacheco, M. (2003). Electronic spectrum of two coupled semiconductor quantum disks under external fields. *Microelectronics journal*, 34(5):733–736.
- [Nguyen and Sarma, 2011a] Nguyen, N. T. and Sarma, S. D. (2011a). Erratum: Impurity effects on semiconductor quantum bits in coupled quantum dots [Phys. Rev. B 83, 235322 (2011)]. *Physical Review B*, 84(11):119904.
- [Nguyen and Sarma, 2011b] Nguyen, N. T. and Sarma, S. D. (2011b). Impurity effects on semiconductor quantum bits in coupled quantum dots. *Physical Review B*, 83(23):235322.
- [Peng et al., 2010] Peng, J., Hermannstädter, C., Witzany, M., Heldmaier, M., Wang, L., Kiravittaya, S., Rastelli, A., Schmidt, O. G., Michler, P., and Bester, G. (2010). Heterogeneous confinement in laterally coupled InGaAs/GaAs quantum dot molecules under lateral electric fields. *Physical Review B*, 81(20):205315.
- [Petroff et al., 1982] Petroff, P., Gossard, A., Logan, R., and Wiegmann, W. (1982). Toward quantum well wires: Fabrication and optical properties. *Applied Physics Letters*, 41(7):635–638.
- [Ren et al., 2014] Ren, Y., Wang, L., Liu, Z., and Wu, M. (2014). Energy spectra of three electrons in sige/si/sige laterally coupled triple quantum dots. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 63:329–336.
- [Rodríguez Prada, 2013] Rodríguez Prada, F. A. (2013). *Sistemas de pocas partículas en anillos cuánticos no uniformes*. PhD thesis, Universidad Industrial de Santander.
- [Salamanca-Buentello et al., 2005] Salamanca-Buentello, F., Persad, D. L., Martin, D. K., Daar, A. S., Singer, P. A., et al. (2005). Nanotechnology and the developing world. *PLoS Medicine*, 2(5).
- [Sattler, 2010] Sattler, K. (2010). *Handbook of Nanophysics: Principles and Methods*. Handbook of Nanophysics. CRC Press.
- [Schmidt, 2007] Schmidt, O. (2007). *Lateral Alignment of Epitaxial Quantum Dots*. NanoScience and Technology. Springer.
- [Siripitakchai et al., 2008] Siripitakchai, N., Thet, C., Panyakeow, S., and Kanjanachuchai, S. (2008). Aligned quantum dot molecules with 4 satellite dots by self-assembly. *Microelectronic Engineering*, 85(5):1218–1221.
- [Szafran, 2008] Szafran, B. (2008). Charged coplanar semiconductor quantum rings: Magnetization and inter-ring electron-electron correlation. *Physical Review B*, 77(20):205313.
- [Tessler et al., 2002] Tessler, N., Medvedev, V., Kazes, M., Kan, S., and Banin, U. (2002). Efficient near-infrared polymer nanocrystal light-emitting diodes. *Science*, 295(5559):1506–1508.
- [Wang et al., 2009] Wang, L., Rastelli, A., Kiravittaya, S., Benyoucef, M., and Schmidt, O. G. (2009). Self-assembled quantum dot molecules. *Advanced Materials*, 21(25-26):2601–2618.

- [Whitley and Stroud Jr, 1976] Whitley, R. M. and Stroud Jr, C. (1976). Double optical resonance. *Physical Review A*, 14(4):1498.
- [Wu and Wang, 2013] Wu, J. and Wang, Z. (2013). *Quantum Dot Molecules*. Springer.
- [Xia et al., 2015] Xia, K., Kolesov, R., Wang, Y., Siyushev, P., Reuter, R., Kornher, T., Kukharchyk, N., Wieck, A. D., Villa, B., Yang, S., et al. (2015). All-optical preparation of coherent dark states of a single rare earth ion spin in a crystal. *Physical review letters*, 115(9):093602.
- [Yamagiwa et al., 2006] Yamagiwa, M., Mano, T., Kuroda, T., Tateno, T., Sakoda, K., Kido, G., Koguchi, N., and Minami, F. (2006). Self-assembly of laterally aligned GaAs quantum dot pairs. *arXiv preprint cond-mat/0607549*.