



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: Francisco Manuel Gómez

Campos

Departamento y Área de Conocimiento: Electrónica y Tecnología de los Computadores

Correo electrónico: fmgomez@ugr.es

Cotutor/a:

Departamento y Área de Conocimiento:

Correo electrónico:

Título del Trabajo: Simulación Monte Carlo del transporte de electrones en materiales con banda intermedia basados en puntos cuánticos

Tipología del Trabajo:

(Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14)

(Marcar con X)

1. Revisión bibliográfica	4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio	
2. Estudio de casos teórico-prácticos	5. Elaboración de un proyecto	X
3. Trabajos experimentales	6. Trabajo relacionado con prácticas externas	

Breve descripción del trabajo:

El acoplamiento de los estados de los puntos cuánticos al disponerlos según una red periódica da como resultado la aparición de bandas de energía que, por su menor anchura que las habituales en cristales, se denominan "minibandas". Esta estructura electrónica puede aprovecharse en un tipo de células solares que se han planteado de forma teórica denominadas "células solares de banda intermedia" [1], donde el material que constituyen los puntos cuánticos es su región activa.

Los fenómenos físicos del transporte de electrones en este tipo de materiales no están aún del todo resueltos. Hay autores que modelan el transporte mediante mecanismos de "hopping" [2] mientras que otros autores lo modelan mediante transporte semiclásico por minibandas [3]. En este trabajo se modelará mediante el método Monte Carlo el transporte por minibandas usando un modelo simplificado donde el mecanismo de dispersión se debe a la variación de tamaño de los puntos cuánticos de la muestra.

Objetivos planteados:

- Modelar de forma analítica una minibanda que se corresponda aproximadamente con la banda intermedia de una red de puntos cuánticos.
- Modelar los mecanismos de dispersión presentes en el material.
- Implementar un simulador del transporte basado en el método Monte Carlo.
- Comparar los resultados obtenidos con los proporcionados por modelos más complejos.

Metodología:

- Se realizará una búsqueda bibliográfica de artículos científicos sobre el tema.
- Se investigará sobre técnicas para ajustar analíticamente una minibanda de energía previamente calculada.



- Se realizará una simplificación de los mecanismos de dispersión que se han venido usando en la bibliografía, posiblemente estableciendo una expresión analítica para los mismos mediante métodos de ajuste.
- Se implementará un simulador basado en el método Monte Carlo a partir de la minibanda y de los mecanismos de dispersión usando preferentemente el lenguaje de programación Python.
- Se compararán los resultados obtenidos con el simulador con los publicados con modelos más complejos. Se observarán las similitudes y las diferencias obtenidas, estableciendo el límite de aplicación del simulador desarrollado en este trabajo.

Bibliografía:

- [1] A. Luque, A. Martí, “Increasing the Efficiency of Ideal Solar Cells by Photon Induced Transitions at Intermediate Levels”, Phys. Rev. Lett. 78, 5014 (1997)
- [2] P. Guyot-Sionnest, “Electrical Transport in Colloidal Quantum Dot Films”, J. Phys. Chem. Lett., 3, 1169–1175 (2012)
- [3] F. M. Califano, S. Rodríguez-Bolívar, M. Califano, “High-Mobility Toolkit for Quantum Dot Films”, ACS Photonics, 3, 2059–2067 (2016)

A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG

Alumno/a propuesto/a: Francisco Javier Marín Rodríguez

Granada, 19 de mayo 2022



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

Sello del Departamento

*Campus Fuentenueva
Avda. Fuentenueva s/n
18071 Granada
Tfno. +34-958242736
almartin@ugr.es*

Comisión Docente de Físicas
Facultad de Ciencias