



UNIVERSIDAD DE GRANADA

Facultad de Ciencias

GRADO EN FÍSICA

TRABAJO FIN DE GRADO

**Estudio de la absorción de fotones en
redes periódicas de puntos cuánticos
mediante modelos simplificados.**

Presentado por:
D. Manuel Almagro Rivas

Curso Académico 2023/2024.

Resumen

Las células solares de banda intermedia, una tecnología aún en desarrollo, tienen el potencial de duplicar las eficiencias disponibles actualmente. La comprensión de la física de los puntos cuánticos y los factores que influyen en su estructura de bandas es esencial para materializar este avance. En este trabajo presentamos un modelo de la absorción de fotones en una red bidimensional de puntos cuánticos. Exploramos cómo diversos factores afectan su espectro de absorción y determinamos una configuración que maximiza la absorción de luz solar.

Abstract

Intermediate band solar cells, a technology still in development, have the potential to double the efficiencies currently available. Grasping the physics of quantum dots and the factors shaping their band structure is pivotal in realizing this technological advancement. This study portrays a comprehensive model of photon absorption in a two-dimensional lattice of quantum dots. We delve into how the parameters defining this lattice impact its absorption spectrum and identify a configuration optimizing solar light absorption.

Índice

1	Introducción	4
2	Fundamento teórico	6
2.1	Estudio de la absorción de fotones	6
2.1.1	La regla de oro de Fermi	6
2.1.2	La perturbación electromagnética	7
2.1.3	Cálculo de α	10
2.2	Modelo simplificado de una red de puntos cuánticos	11
2.2.1	Caso unidimensional	12
2.2.2	Caso bidimensional	13
2.2.3	Otras consideraciones	15
3	Metodología	15
3.1	Software y hardware empleados	15
3.2	Consideraciones generales sobre la computación	16
4	Resultados	17
4.1	Modelo de Kronig-Penney 2D	17
4.1.1	Estructura de bandas	18
4.1.2	Funciones de onda	20
4.2	Cálculo de α	24
4.2.1	Comentarios preliminares	24
4.2.2	Influencia de la distancia entre puntos	26
4.2.3	Influencia de la separación entre puntos	28
4.2.4	Influencia de la temperatura	29
4.2.5	Influencia del potencial	29
4.3	Estimación de parámetros óptimos	30
5	Conclusiones	32
6	Agradecimientos	34
	Referencias	35

1 Introducción

Existe una fuerte tendencia, más marcada en las últimas décadas, a disminuir la dependencia de fuentes de energía basadas en combustibles fósiles. Los motivos son muchos y variados, siendo el más importante la evidencia acumulada de que el calentamiento global es de origen antropogénico [1] [2]. En España, el 56.7 % de la energía consumida a través de la red eléctrica provenía de fuentes renovables en 2021 [3]; y dentro de este grupo, prácticamente la mayoría de la potencia que se instaló en 2021 (el 80.4 %) es de origen fotovoltaico. Sin embargo, las tecnologías actuales basadas en paneles de silicio presentan una serie de limitaciones bien conocidas. Una de las más importantes es su eficiencia; las estimaciones más recientes [4] para el silicio no dopado a temperatura ambiente apuntan a una eficiencia máxima teórica del 29.43 %. (Esto supone una pequeña reducción al límite de 30 % ya calculado por Shockley y Queisser en 1961 [5]) No es de extrañar, por tanto, que resulte de gran interés encontrar métodos que permitan suplir las carencias de la actual tecnología basada en paneles de silicio. Una de estas alternativas, las células solares de banda intermedia, pueden entenderse como resultado de dos líneas de investigación que confluyeron a mediados de la década de 1990.

Durante segunda mitad del siglo XX tuvo lugar una revolución en el estudio de lo que ahora conocemos como "nanomateriales". Una acumulación de evidencia sugería que, para sistemas formados por cristales nanométricos, sus propiedades ópticas dependen estrechamente de las dimensiones de los cristales involucrados [6]. Esto llevó al físico soviético Alexei Ekimov a publicar varios artículos (en colaboración con otros autores) en los que se interpretó correctamente el origen de estas propiedades ópticas como cuántico y dependiente del tamaño del nanocrystal [7, 8]. Simultáneamente y de forma independiente, el ruso Alexander Efros publicó un artículo detallando que, para estos materiales, el confinamiento cuántico de los electrones explica la dependencia entre el tamaño del nanocrystal y sus propiedades ópticas [9]. Un año después, el químico estadounidense Louis Brus publicó un artículo explorando estos efectos cuánticos para una solución coloidal de nanocrstales [10]. Fue una época en la que el estudio de los nanocrstales floreció y dio lugar a novedosas líneas de investigación. La creación del estudio de estos nanocrstales valió a Ekimov y Brus (junto al químico franco-tunecino Moungi Bawendi) el Premio Nobel de Química de 2023 [11].

No fue hasta 1988 que estos cristales se bautizaron como *quantum dots*, puntos cuánticos [12]. Específicamente, el término designa a un pozo de potencial electrostático, tridimensional y compuesto de un material semiconductor. Un punto cuántico es capaz de confinar un electrón en las tres dimensiones. En la práctica, suelen consistir en un agregado de unos pocos átomos, desde las decenas hasta los cientos, con unas dimensiones en la escala de los nanómetros. Este agregado se comporta como un átomo artificial, exhibiendo niveles de energía discretos. Los puntos cuánticos son manufacturados de forma rutinaria en la actualidad, encontrando su nicho comercial en la fabricación de televisores de alta calidad.

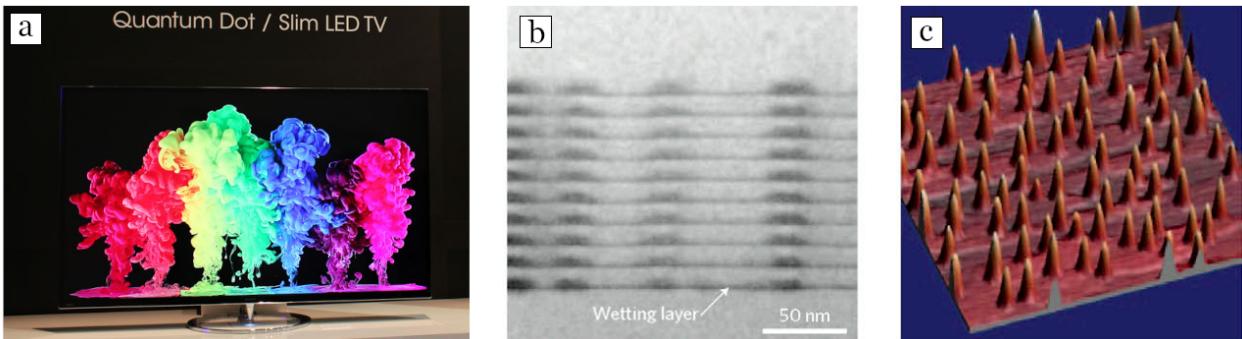


Figura 1: (a) Televisión con panel de puntos cuánticos (QLED). (b) Imagen obtenida por microscopía electrónica de transmisión de varias capas de puntos cuánticos alineados. (c) Imagen obtenida por microscopía de fuerza atómica de una lámina de puntos cuánticos, en desorden. *Fuentes:* Sony (a), Luque et al. [13] (b) y (c).

Durante la década de 1990 comenzaron a publicarse artículos sobre dispositivos conocidos como células solares de banda intermedia, o *intermediate-band solar cells*. Estos dispositivos, aún en estado de desarrollo, son capaces de generar una corriente alta con un voltaje también elevado (en comparación con las células solares tradicionales) debido a la introducción de una banda de energía dentro de la banda prohibida del material semiconductor utilizado [13]. Esta banda intermedia, situada entre la banda de valencia y la banda de conducción del material, sirve de escalón para que los electrones de valencia del material puedan promocionar a la banda de conducción. Este proceso requeriría dos fotones de menor energía en lugar de un único fotón más energético. En 1997, utilizando un enfoque análogo al de Shockley y Queisser en 1961 [5], se estimó que la eficiencia máxima de estas células fotovoltaicas sería del 63% [14]: una eficiencia de más del doble de la calculada para células solares tradicionales. Además, estas células solares ofrecen otras ventajas. La estructura de bandas resultante (y por tanto, sus propiedades ópticas y de absorción) pueden modificarse de forma muy precisa cambiando los parámetros físicos del sistema [15].

Estas dos líneas de investigación convergen de una forma clara en teoría, pero cuyas implicaciones prácticas aún no se han resuelto. Los puntos cuánticos pueden disponerse de forma ordenada en dos dimensiones para formar una red. De esta ordenación periódica surge una estructura de bandas, de forma totalmente análoga a cómo surge una estructura de bandas de una red de átomos. Dicha estructura puede ser controlada modificando a conveniencia las dimensiones de los puntos cuánticos, así como su disposición. Encontramos en los puntos cuánticos un buen candidato para introducir la interbanda que ya hemos mencionado en el *gap* de un semiconductor, facilitando el camino para conseguir, en la práctica, célula solares de banda intermedia.

El objetivo de éste trabajo es examinar la física asociada a una red bidimensional de puntos cuánticos. Estudiaremos la influencia de cada parámetro de la red en su capacidad para absorber fotones. Finalmente, utilizaremos el conocimiento

adquirido para encontrar una configuración que maximice la absorción.

2 Fundamento teórico

El fundamento teórico necesario para llevar a cabo nuestro cálculo está dividido en dos secciones diferenciadas. Por un lado, es necesario establecer la teoría de la absorción y emisión de fotones en un material macroscópico. Esta teoría es de carácter general, y la presentaremos aquí como tal, sin hacer referencia alguna al sistema particular que estudiamos en este trabajo. Por otro lado, nos centraremos nuestro sistema: una red bidimensional infinita de pozos cuadrados finitos. La física de dicho sistema se estudiará, con sus particularidades, en el segundo apartado de esta sección.

2.1 Estudio de la absorción de fotones

2.1.1 La regla de oro de Fermi

El estudio de la interacción entre luz y materia fue objeto de enormes avances con el advenimiento de la mecánica cuántica a principios del siglo pasado. El responsable de muchos de estos avances fue el físico británico Paul Dirac, que en 1927 publicó un artículo exponiendo la teoría mecanocuántica de perturbaciones hasta segundo orden [16]. Fue el italiano Enrico Fermi quien se refirió dos décadas más tarde al resultado obtenido por Dirac, la perturbación de primer orden, como la «regla de oro número dos»[17]. Este apelativo ganó popularidad, y es como se conoce actualmente al resultado utilísimo que exponemos a continuación.

La regla de oro de Fermi nos proporciona la probabilidad (por unidad de tiempo) de que tenga lugar la absorción de un fotón. En términos más concretos, estudiamos el proceso por el cual un electrón promociona desde un estado $|\psi_a\rangle$ con energía E_a a un estado $|\psi_b\rangle$ con energía E_b , de modo que $E_a < E_b$:

$$W_{\text{abs}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_b | H' | \psi_a \rangle|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega) \quad (2.1)$$

(Siendo H' la perturbación del hamiltoniano de un electrón asociada a la interacción electromagnética, algo que exploraremos en detalle). Para el proceso complementario, la emisión de un fotón, tendríamos la probabilidad por unidad de tiempo siguiente:

$$W_{\text{ems}} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_a | H'^+(r) | \psi_b \rangle|^2 \delta(E_a - E_b + \hbar\omega). \quad (2.2)$$

(Donde H'^+ es el adjunto del hamiltoniano). Estas expresiones hacen referencia a emisiones puntuales entre dos niveles de energía dados. Sin embargo, no nos interesa conocer únicamente la probabilidad de que se den transiciones puntuales; queremos calcular la probabilidad de que estos procesos tengan lugar en un medio macroscópico por unidad de tiempo y volumen. Consideremos lo siguiente:

- Es necesario normalizar esta probabilidad por unidad de volumen V .
- No todos los niveles energéticos estarán poblados por igual: la distribución de Fermi-Dirac del nivel k -ésimo, f_k , modulará cada transición posible
- Las transiciones pueden implicar un cambio de momentos, aunque más tarde comprobaremos que en nuestro caso podemos considerar únicamente transiciones verticales; eso no es cierto en general.
- El electrón es un fermión con espín $1/2$, y por tanto con degeneración de espín $\sigma_s = 2$.

Podemos tener estas tres cosas en cuenta introduciendo dos sumas cuyos índices recorren cada posible transición entre momentos. También hemos de introducir un factor $1/V$, para normalizar por el volumen; un factor de $\sigma_s = 2$, para considerar la degeneración de espín; y un factor que contenga el producto de los niveles de ocupación de cada nivel, para modular las posibles transiciones de acuerdo a la estadística de Fermi-Dirac. Así, obtenemos respectivamente las probabilidades por unidad de tiempo y volumen de que se den absorciones y emisiones:

$$R_{\text{abs}} = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_a} \sum_{\mathbf{k}_b} \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega) f_a (1 - f_b) \quad (2.3)$$

$$R_{\text{ems}} = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_a} \sum_{\mathbf{k}_b} \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{ab}^+|^2 \delta(E_a - E_b + \hbar\omega) f_b (1 - f_a). \quad (2.4)$$

(Hemos hecho aquí un cambio de notación por comodidad: H'_{ba} es el elemento de matriz $\langle \psi_b | H'(r) | \psi_a \rangle$). Finalmente, basta con recordar que nuestro interés yace en el cálculo del ritmo neto de absorciones. La emisión de un fotón y la absorción de un fotón son procesos complementarios, de modo que el ritmo neto de absorción R puede entenderse, simplemente, como la diferencia entre las absorciones y las emisiones ($R_{\text{abs}} - R_{\text{ems}}$):

$$\begin{aligned} R &= R_{\text{abs}} - R_{\text{ems}} \\ &= \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_a} \sum_{\mathbf{k}_b} \frac{2\pi}{\hbar} |H'_{ba}|^2 \delta(E_b - E_a - \hbar\omega) (f_a - f_b) \end{aligned} \quad (2.5)$$

Se ha utilizado aquí que el hamiltoniano correspondiente a la perturbación electromagnética es hermítico ($|H'_{ba}| = |H'_{ab}^+|$) y la función delta de Dirac es par ($\delta(x) = \delta(-x)$). El anterior desarrollo puede consultarse en más detalle en [18], así como el formalismo de teoría de perturbaciones dependientes del tiempo [19].

2.1.2 La perturbación electromagnética

Durante el anterior apartado hemos hablado de la perturbación electromagnética H' , pero solo en términos generales. Conviene repasar aquí las nociones teoría de perturbaciones para facilitar al lector la comprensión del siguiente desarrollo.

La teoría de perturbaciones mecanocuántica es útil porque facilita enormemente el estudio de ciertos problemas. La heurística consiste en descomponer un problema (como la interacción luz-materia) en un fenómeno principal (el comportamiento de un electrón libre) y un efecto de menor magnitud (la acción de un fotón sobre un electrón). Suponemos que el fotón causa un pequeño desvío en el comportamiento del electrón libre, y esta modificación puede reflejarse matemáticamente como una corrección al hamiltoniano usual.

Procedemos de la siguiente manera. Partimos del hamiltoniano de un electrón que interactúa con un fotón [20], que viene dado por:

$$H = \frac{1}{2m_0}(\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

Donde m_0 es la masa del electrón libre, \mathbf{p} es el momento del electrón, \mathbf{A} es el vector potencial magnético y $V(\mathbf{r})$ es el potencial periódico en el que se mueve el electrón. La carga del electrón, e , lleva implícito el signo negativo. Podemos expandir la Ec. 2.6 de modo que:

$$H = \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) - \frac{e}{2m_0}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} + \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}) + \frac{e^2 A^2}{2m_0} \quad (2.7)$$

Como hemos asumido que la acción del fotón influye poco en el comportamiento del electrón, el cuadrático en eA puede despreciarse por ser, para nuestros propósitos, mucho menor que los términos lineales en \mathbf{A} . Podemos simplificar esto un poco más. Cuando se utilizan las ecuaciones de Maxwell, hay ciertos grados de libertad en cuanto a la elección de las condiciones matemáticas para los potenciales. Una de las condiciones que se suelen elegir por facilitar la resolución de las ecuaciones de Maxwell es el llamado gauge de Coulomb. Éste implica escoger un potencial vectorial tal que su divergencia sea nula, de modo que $\nabla \cdot \mathbf{A} = 0$. Utilizando además la equivalencia del operador momento $\mathbf{p} = (\hbar/i)\nabla$, es inmediato que $\mathbf{p} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$. Llegamos entonces a:

$$H \approx \frac{p^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) - \frac{e}{m_0}\mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \equiv H_0 + H' \quad (2.8)$$

Donde hemos escrito nuestro hamiltoniano completo H , de forma aproximada, como el hamiltoniano de un electrón libre con una pequeña corrección H' , nuestra perturbación.

Podemos continuar modificando este resultado para que nos resulte más útil. Si consideramos que las ondas de nuestro campo electromagnético son planas (una suposición que no es correcta, pero que facilita el tratamiento matemático) podemos escribir la perturbación como:

$$\begin{aligned} H'(\mathbf{r}, t) &= -\frac{e}{m_0}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) \cdot \mathbf{p} \\ &= H'(\mathbf{r})e^{-i\omega t} + H'^+(\mathbf{r})e^{+i\omega t} \end{aligned} \quad (2.9)$$

Donde

$$H'(\mathbf{r}) = -\frac{eA_0 e^{i\mathbf{k}_{\text{op}} \cdot \mathbf{r}}}{2m_0} \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} \quad (2.10)$$

Este resultado puede simplificarse utilizando la aproximación de dipolo. Esta aproximación es válida cuando la longitud de onda de la luz es mucho mayor que la distancia típica involucrada nuestro problema (del orden de nanómetros). Esto, como comprobaremos, es cierto. El resultado es que la exponencial puede aproximarse a la unidad. De este modo, $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = A_0 e^{i\mathbf{k}_{\text{op}} \cdot \mathbf{r}} \hat{\mathbf{e}} \simeq A_0 \hat{\mathbf{e}}$ y obtenemos:

$$H'(\mathbf{r}) \approx -\frac{eA_0}{2m_0} \hat{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{p} \quad (2.11)$$

Y recordando de nuevo la correspondencia mecanocuántica del operador momento $\mathbf{p} = (\hbar/i)\nabla$, llegamos a:

$$H'(\mathbf{r}) \approx -\frac{eA_0 \hbar}{2m_0} \hat{\mathbf{e}} \cdot \nabla \quad (2.12)$$

Ahora que hemos identificado claramente nuestra perturbación, es posible incluirla en la expresión que hallamos anteriormente para el ritmo de absorciones por unidad de volumen (Ec. 2.5). Obtenemos así:

$$R = \frac{1}{V} \left(\frac{\pi e^2 \hbar A_0^2}{m_0} \right) \sum_{\mathbf{k}_i} \sum_{\mathbf{k}_f} |\hat{\mathbf{e}} \cdot \langle \psi_f | \nabla | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)(f_i - f_f) \quad (2.13)$$

Un resultado que nos será de gran utilidad.



También llegaremos a un resultado útil suponiendo que $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$, el potencial vector, es armónico. Asumiendo que tiene la forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \hat{\mathbf{e}} A_0 \cos(\mathbf{k}_{\text{op}} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \\ &= \hat{\mathbf{e}} \frac{A_0}{2} e^{i\mathbf{k}_{\text{op}} \cdot \mathbf{r}} e^{-i\omega t} + \hat{\mathbf{e}} \frac{A_0}{2} e^{-i\mathbf{k}_{\text{op}} \cdot \mathbf{r}} e^{+i\omega t} \end{aligned} \quad (2.14)$$

(Donde ω es la frecuencia del fotón, \mathbf{k}_{op} el vector de onda y A_0 la amplitud). Es posible calcular tanto el campo eléctrico \mathbf{E} como la excitación magnética \mathbf{H} . Recordando la relación de ambas con el vector potencial magnético [21], el cálculo es inmediato:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\hat{\mathbf{e}} \omega \mathbf{A}_0 \sin(\mathbf{k}_{\text{op}} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{A} = -\frac{1}{\mu} \mathbf{k}_{\text{op}} \times \hat{\mathbf{e}} A_0 \sin(\mathbf{k}_{\text{op}} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \end{aligned} \quad (2.15)$$

(Siendo, como siempre, que \mathbf{E} apunta en la dirección de polarización, $\hat{\mathbf{e}}$, y \mathbf{H} perpendicular a ésta y a la dirección de propagación). Esto nos permite calcular el

vector de Poynting:

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) \times \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \hat{k}k_{\text{op}} \frac{\omega A_0^2}{\mu} \sin^2(\mathbf{k}_{\text{op}} \cdot \mathbf{r} - \omega t) \quad (2.16)$$

Y conociendo que el promedio temporal de la función $\sin^2(\bullet)$ es $1/2$ y la relación entre la permitividad eléctrica (μ), la permeabilidad magnética (ϵ) y la velocidad de la radiación electromagnética (c) viene dada por $1/c^2 = \mu\epsilon$:

$$P = |\langle \mathbf{P}(\mathbf{r}, t) \rangle| = \frac{\omega A_0^2}{2\mu} k_{\text{op}} = \frac{n_r c \epsilon_0 \omega^2 A_0^2}{2} \quad (2.17)$$

Esta magnitud, el promedio temporal en un ciclo del vector de Poynting, se conoce como intensidad óptica, y tiene unidades de energía por unidad de superficie y tiempo. Dividiéndola entre la energía de un fotón, $\hbar\omega$, obtenemos el número de fotones por unidad de superficie y tiempo:

$$N(\omega) = \frac{n_r c \epsilon_0 \omega A_0^2}{2\hbar} \quad (2.18)$$

Esto nos será de utilidad a continuación.

2.1.3 Cálculo de α

Disponemos de todos los elementos para calcular en qué medida la luz es absorbida por un medio material. Dicha magnitud se suele expresar mediante el coeficiente de absorción, α . Este coeficiente aparece con frecuencia en el campo de la óptica, y encuentra aplicación experimental en el campo de la química mediante la ley de Beer-Lambert [22]. Podemos proporcionar una definición formal mediante el siguiente escenario. Imagínese un medio material confinado de tal forma que éste tiene una cara plana. Al iluminar esta cara, un número de fotones penetrará el medio. Algunos de estos fotones serán absorbidos al avanzar dentro del medio. Si definimos α de la siguiente manera:

$$\alpha = \frac{\text{fotones absorbidos por unidad de volumen}}{\text{fotones que han penetrado por unidad de área iluminada}} \quad (2.19)$$

Obtendremos un coeficiente con unidades de longitud inversa que expresará en qué medida la luz se ha absorbido por unidad de longitud avanzada. Utilizando las magnitudes ya calculadas en este trabajo, podemos definir el coeficiente de absorción como:

$$\alpha = \frac{R(\omega)}{N(\omega)} \quad (2.20)$$

El numerador, $R(\omega)$, corresponde al ritmo neto de absorción de fotones en un medio material. Esto es algo que ya se estudió (Ec. 2.4). El denominador corresponde al ritmo de absorción por unidad de superficie, que también es una magnitud conocida (Ec. 2.18).

Observamos, en primer lugar, que el coeficiente de absorción depende de la frecuencia (es decir, de la energía) de un fotón. Intuitivamente, un medio con un α alto para una frecuencia implica que el sistema es en gran medida opaco para esta frecuencia, mientras que un α bajo implica que los fotones atraviesan el medio con facilidad.

Podemos obtener una expresión cerrada para α reemplazando en su definición (Ec. 2.19) las expresiones que hallamos anteriormente para $R(\omega)$ y para $N(\omega)$, ambas dependientes de la frecuencia. Llegamos así al siguiente resultado:

$$\alpha(\hbar\omega) = \frac{2}{V} \left(\frac{\pi e^2 \hbar^2}{n_r c \epsilon_0 m_0^2 \omega} \right) \sum_{\mathbf{k}_i} \sum_{\mathbf{k}_f} |\hat{\mathbf{e}} \cdot \langle \psi_f | \nabla | \psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega)(f_i - f_f) \quad (2.21)$$

Esto nos proporciona una pista del aspecto que tendrá una representación gráfica de α . Tenemos dos sumatorias anidadas, de modo que recorreremos valores discretos de momento y agruparemos los valores de la sumatoria según la energía del fotón. Obtendremos, por tanto, un histograma.

2.2 Modelo simplificado de una red de puntos cuánticos

Existen multitud de enfoques diferentes que nos permitirían el estudio de una red de puntos cuánticos. Destacan los modelos basados en aproximaciones de *tight-binding* (en castellano, enlace fuerte), que representan cada punto cuántico como un pozo de potencial suficientemente profundo para confinar de forma efectiva un electrón [23]. También se han obtenido resultados adecuados aplicando aproximaciones de pseudopotencial, donde se reemplaza el potencial que confina un electrón a un punto cuántico (que puede tener una forma complicada) por un potencial matemáticamente más sencillo que retenga las características principales de la interacción [24]. Y al igual que sucede con el estudio de moléculas y de cel-dillas unidad, la teoría de funcionales de densidad (en la literatura, DFT, *density functional theory*) permite obtener la distribución de densidad electrónica que minimiza la energía potencial de un punto cuántico [25]. Existen, de hecho, multitud de métodos más complejos o computacionalmente exigentes que servirían como aproximación a la física de un punto cuántico. Baste mencionar, como ejemplo, los métodos Monte Carlo cuánticos, los métodos $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$, los métodos de interacción de configuraciones, o los métodos basados en la teoría de Hartree-Fock [26]. Todas estas aproximaciones proporcionan resultados válidos.

Sin embargo, consideramos de especial interés adoptar un método que no requiere introducir un nuevo marco teórico (como sucede con los modelos basados en DFT) o que no sea dependiente de las particularidades de los potenciales involucrados (en el caso de los métodos basados en *tight-binding*). Es por ello que optamos por partir de hechos ya conocidos de teoría cuántica, resolviendo directamente la ecuación de Schrödinger por métodos numéricos elementales. Esto ubica el cálculo en un contexto conocido, pone énfasis en la física en lugar del procedimiento numérico, y nos permite retener un vínculo claro entre el sistema

estudiado y los resultados obtenidos sin capas de abstracción adicionales.

Una vez hayamos decidido cómo vamos a estudiar el sistema, necesitamos hacer más específico nuestro objeto de estudio. En este contexto, ¿qué es un punto cuántico? ¿Cómo se distribuyen espacialmente los puntos cuánticos que conforman la red bidimensional? Presentaremos una breve respuesta a continuación, la cual nos servirá como motivación para introducir el método que se ha seleccionado para el presente trabajo.



Un punto cuántico es, en esencia, un potencial tridimensional. Para dos de las dimensiones, consideramos que el potencial es un pozo cuadrado finito. Para la dimensión restante, consideramos que el potencial es infinito en todos los puntos salvo en el plano de la red, de modo que el electrón está confinado al plano. Esta es una elección arbitraria, pero sin duda más sencilla que otras posibilidades (como considerar pozos *coulombianos*, una elección más realista). Estos pozos se distribuyen formando una red periódica bidimensional e infinita. La dificultad matemática de este enfoque reside, por tanto, en resolver la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico como el descrito.

Puede parecer que hemos descrito una situación muy concreta: necesitamos resolver la ecuación de Schrödinger para un potencial periódico de pozos cuadrados finitos. Sin embargo, este modelo existe (en una dimensión) y fue estudiado por Ralph Kronig y William Penney en 1931 [27]. Nuestro objetivo es estudiar una versión bidimensional del modelo de Kronig-Penney. Esto es algo que ya se ha hecho de forma satisfactoria a través de métodos numéricos sencillos, tanto en una dimensión [28] como en dos dimensiones [29], utilizando potenciales arbitrarios. En este trabajo utilizaremos el método descrito por los autores en los dos artículos mencionados; utilizaremos la base ortonormal asociada a un pozo finito cuadrado con condiciones de contorno periódicas, planteando un hamiltoniano que diagonalizaremos. Obtendremos así los autovectores y los autovalores. Utilizar este método tiene el beneficio adicional de que, al lidiar con una base de ondas planas, las consideraciones de convergencia se simplifican.

Para facilitar la comprensión del método se presentan aquí la versión unidimensional, correspondiente al modelo de Kronig-Penney clásico, y la versión bidimensional, que será la que utilizaremos.

2.2.1 Caso unidimensional

Los detalles del método pueden consultarse en la bibliografía [28]. Se exponen aquí los puntos clave del procedimiento seguido. Partimos de la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo, con nuestra función de onda estando ex-

pandida en alguna base ortonormal sin especificar:

$$(H_0 + V)|\psi\rangle = E|\psi\rangle \quad ; \quad |\psi\rangle = \sum_{m=1}^{\infty} c_m |\psi_m\rangle \quad (2.22)$$

Escribiendo la función de onda en su forma expandida,

$$\sum_{m=1}^{\infty} c_m (H_0 + V) |\psi_m\rangle = E \sum_{m=1}^{\infty} c_m |\psi_m\rangle \quad (2.23)$$

Y aplicando el bra $\langle \psi_n |$ a ambos lados,

$$\sum_{m=1}^{\infty} H_{nm} c_m = E c_n \quad (2.24)$$

Con $H_{nm} \equiv \langle \psi_n | (H_0 + V) |\psi_m\rangle$. Por el momento no se ha hecho ninguna aproximación: esto es válido para cualquier base ortonormal. Teniendo en cuenta el sistema que queremos estudiar, sería conveniente utilizar la base asociada a un pozo cuadrado finito con condiciones de contorno periódicas. Ésta base tiene autovectores y autovalores dados por:

$$\psi_n^{(0)}(x) = \sqrt{\frac{1}{a}} \exp\left(i\frac{2\pi n}{a}x\right) \quad ; \quad E_n^{(0)} = 4 \left(\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}\right) \quad (2.25)$$

Donde a es la constante de red y n un número entero. Sin embargo, no queremos utilizar condiciones periódicas, sino condiciones de Bloch (en virtud del teorema de Bloch). Modificando las condiciones periódicas ($ka = 2\pi n$, con $k \in \mathbb{Z}$) por la condición de Bloch, $ka = 2\pi n + Ka$, donde k es un número entero y $Ka \in [-\pi, +\pi]$ es el vector de onda, se obtiene:

$$\psi_n^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{a}} \exp\left[i\frac{2\pi n + Ka}{a}x\right] \quad ; \quad E_n^{(0)} = 4 \left(\frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2m_0a^2}\right) \quad (2.26)$$

Siendo esta la función de onda sin modular por el factor de Bloch. Observando la ecuación de autovalores (Ec. 2.24), vemos que hemos obtenido el elemento H_{nm} del hamiltoniano a estudiar:

$$\begin{aligned} H_{nm} &= \langle \psi_n^{(0)} | (H_0 + V(x)) | \psi_m^{(0)} \rangle \\ &= \delta_{nm} E_n^{(0)} + \langle \psi_n^{(0)} | V(x) | \psi_m^{(0)} \rangle \\ &= \delta_{nm} E_n^{(0)} + \frac{1}{a} \int_0^a dx \exp\left(-i\frac{2\pi n}{a}x\right) V(x) \exp\left(i\frac{2\pi m}{a}x\right) \end{aligned} \quad (2.27)$$

2.2.2 Caso bidimensional

El paso a dos dimensiones no es trivial; de nuevo, los detalles pueden consultarse en la bibliografía citada [29]. La base análoga en dos dimensiones viene dada por:

$$\psi_{n_x, n_y}^{(0)}(x, y) = \frac{1}{\sqrt{a_x a_y}} \exp\left(i\frac{2\pi n_x}{a_x}x + i\frac{2\pi n_y}{a_y}y\right) \quad (2.28)$$

E incorporando el factor de Bloch, cualquier estado que hallemos en dos dimensiones podrá escribirse como:

$$\psi(x, y) = \frac{1}{\sqrt{a_x a_y}} \exp(iK_x x) \exp(iK_y y) \sum_{n_x} \sum_{n_y} b(n_x, n_y) \exp\left(\frac{2\pi i n_x}{a_x} x\right) \exp\left(\frac{2\pi i n_y}{a_y} y\right) \quad (2.29)$$

Siendo el autovalor asociado a cada elemento de la base:

$$E_{n_x n_y}^{(0)} = 4 \left[n_x^2 + n_y^2 \left(\frac{a_x^2}{a_y^2} \right) \right] \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_0 a^2} \quad (2.30)$$

Donde a_x y a_y son las constantes de red en cada una de las dimensiones, $(K_x a_x, K_y a_y)$ es un punto de la primera zona de Brillouin del espacio recíproco y $b(n_x, n_y)$ son los coeficientes que multiplican a cada elemento de la base. El análogo de la Ec. 2.27 en dos dimensiones viene dado por:

$$\begin{aligned} H_{n_x n_y, m_x m_y} &= \langle \psi_{n_x n_y}^{(0)} | (H_0 + V(x, y)) | \psi_{m_x m_y}^{(0)} \rangle \\ &= \delta_{n_x m_x} \delta_{n_y m_y} E_{n_x n_y}^{(0)} + \langle \psi_{n_x n_y}^{(0)} | V(x, y) | \psi_{m_x m_y}^{(0)} \rangle \end{aligned} \quad (2.31)$$

Ahora tenemos el componente que nos faltaba para particularizar aún más la Ecuación 2.21. Es posible aplicar al braket que aparece en dicha expresión la aproximación de la envolvente lenta, conocida en la literatura como la *slowly varying envelope approximation* [30]. Dado que nuestra función de onda es el producto de un factor de Bloch y una función $u(x, y)$ con la periodicidad de la red, podemos separar el braket en dos integrales. El resultado es que nuestro braket se reduce convenientemente a lo siguiente:

$$\langle \psi_b | \nabla | \psi_a \rangle \approx 2\pi\hbar \sum_{n_x} \sum_{n_y} b_b^*(n_x, n_y) b_a(n_x, n_y) \left(\frac{n_x}{a_x}, \frac{n_y}{a_y} \right) \quad (2.32)$$

Siendo b_b y b_a los coeficientes asociados, respectivamente, a las bandas de mayor y menor energía para cada promoción electrónica posible en nuestro sistema. En resumen, nuestro problema queda reducido a:

1. Para cada punto del espacio recíproco ($K_x a_x, K_y a_y$):
 - a) Calcular tantos elementos de la matriz dada por la Ec. 2.31 como sean necesarios para convergencia.
 - b) Diagonalizar dicha matriz. Los autovalores corresponderán a los niveles de energía, mientras que los autovectores columna recogerán las coordenadas de la función de onda en la base utilizada.
2. Repetir lo anterior hasta cubrir toda la primera zona de Brillouin.
3. Almacenar en un *array* multidimensional los valores de energía calculados para cada punto de la primera ZB, que serán múltiples (pues nos interesa estudiar tantas transiciones como puedan suceder en un sistema real).

2.2.3 Otras consideraciones

La presencia de la distribución de Fermi-Dirac en la definición de α (Ec. 2.21) no se ha discutido en detalle. Esta distribución, que describe cuán poblado se hallará un nivel energético ε_k a una temperatura T , viene dada por:

$$f_k(\varepsilon, T) = \frac{1}{e^{(\varepsilon_i - \mu)/k_B T} + 1} \quad (2.33)$$

(Donde k_B es la constante de Boltzmann y μ el nivel de Fermi). La inclusión de μ introduce una capa adicional de complejidad al cálculo. A pesar de ello, optaremos por seguir la tendencia predominante en la literatura y evitar involucrarnos en cálculos detallados para obtener un valor numérico preciso del nivel de Fermi. En cambio, mantendremos una aproximación constante a lo largo de nuestro trabajo al establecer el nivel de Fermi en el centro de la banda prohibida. De esta manera, identificamos la banda de menor energía como la banda de valencia, y la inmediatamente superior como la banda de conducción. Aunque esta elección pueda parecer arbitraria, no es una práctica sin fundamento; dada la naturaleza aproximada de nuestro enfoque, determinar un valor exacto para μ no ofrecería ventajas significativas; una estimación es tan sólida como la suposición más débil sobre la cual descansa.

3 Metodología

3.1 Software y hardware empleados

El código utilizado en la elaboración del presente trabajo se ha escrito íntegramente en el lenguaje de programación R en su versión 4.2.2. Los motivos de esta elección son los siguientes:

- La mayoría de las rutinas numéricas que implementa R de forma nativa son portes directos desde Fortran o C, cuando no ejecuciones directas de código en estos dos lenguajes. Esto garantiza ejecuciones rápidas sin prescindir de la sintaxis sencilla propia de un lenguaje de programación moderno.
- Existe una colección amplísima de librerías, lo que garantiza que la mayoría de las necesidades relativas a la manipulación, análisis y representación de datos quedan cubiertas con un solo lenguaje.
- Si una tarea requiere utilizar *software* especializado, es sencillo crear *pipelines* entre R y aplicaciones externas.
- R es *software* libre, de modo que es posible consultar el código que se está ejecutando al llamar a una función. Esto proporciona un mayor grado de control, especialmente al utilizar paquetes de funciones escritos por terceros.

El único paquete externo utilizado es "plot3D"[31]. Los resultados y las gráficas que aparecen aquí han sido elaboradas por el autor, excepto cuando se mencione

lo contrario (en cuyo caso se citará la fuente original). Una versión genérica del código que se ha escrito para este trabajo puede consultarse en el [perfil de GitHub](#) del autor.

Los cálculos han sido ejecutados en un computador doméstico, con una CPU Apple M1 @ 3.2 GHz y 8 GB de memoria RAM. Las limitaciones comentadas aplican a este escenario; el uso de un ordenador de mayor rendimiento habría permitido obtener resultados con una resolución mayor, pero consideramos que la naturaleza aproximada de los resultados obtenidos no requiere de más recursos que los ya dedicados.

3.2 Consideraciones generales sobre la computación

Para implementar el cálculo descrito en la sección anterior debemos primero llevar a cabo algunas consideraciones más sutiles. Necesitamos asegurarnos de que se alcanza convergencia, pero la exigencia numérica del procedimiento limita el nivel de detalle al que podemos acceder con un computador doméstico. Aunque obtendremos muchos autovalores para cada punto del espacio recíproco, no todos serán exactos. De hecho, vamos a comprobar a continuación que necesitamos calcular muchos más autovalores de los que posteriormente nos serán útiles. Considerérense estos dos puntos:

- Un fotón en el ultravioleta cercano tiene una energía de unos ~ 3.5 eV. Observando los autovalores de la base que hemos elegido (Ec. 2.30) vemos que para $n_x, n_y \approx 2$ llegamos a valores de energía de 3 eV; no necesitaremos más que las primeras transiciones electrónicas posibles, pues las demás no son relevantes.
- Considerando la base utilizada (Ec. 2.28), vemos que la discretización que hagamos del espacio directo nos acotará superiormente el número de términos a considerar al construir nuestra función de onda. Para simplificar la programación, discretizaremos tanto el espacio recíproco como el espacio directo con 201×201 nodos, para incluir el punto $(K_x, K_y)=(0, 0)$. Esto significa que nuestra celda unidad estará formada por subdivisiones de tamaño $\sim a/201$. La longitud de onda más pequeña utilizable (si deseamos conservar algún tipo de detalle) será $\lambda \approx \frac{2}{201}a$, y por la forma de la base, esto implica $n_x, n_y \approx 100$. Esto es nuestra cota máxima.

Combinando lo que hemos expuesto, concluimos que necesitamos (i) considerar valores de $n_x, n_y \leq 100$ (pues valores más altos serán completamente inutilizables, por no ser nuestra discretización suficientemente fina); (ii) considerar valores de n_x, n_y suficientemente altos, para que las primeras superficies de energía incluyan tanto nivel de detalle y sean tan exactas como sea posible. Es necesario llegar a un compromiso entre precisión y rendimiento.

Con este propósito, los números cuánticos escogidos en la elaboración de este trabajo son $n_x, n_y = 7$. El motivo es el siguiente: la matriz a diagonalizar recorrerá todas las combinaciones de números cuánticos en el rango $-7 \leq n_x \leq 7$

y $-7 \leq n_y \leq 7$. (En general, si truncamos por igual ambos números cuánticos, $n \equiv n_x = n_y$, el tamaño de la matriz vendrá dado por $(2n + 1)^2 \times (2n + 1)^2$). Diagonalizaremos por tanto una matriz de 225×225 , y esto habrá que hacerlo para cada punto del espacio recíproco, y para cada uno de los niveles de energía a calcular. Si para el cálculo de α el espacio recíproco es discretizado en 201×201 nodos y nos interesan los primeros ~ 3 niveles de energía, tendremos que diagonalizar $201 \times 201 \times 3 = 121203$ matrices de 225×225 , ordenar sus autovalores, mantenerlos en memoria junto a los autovectores y posteriormente operar con ellos. Se ha comprobado durante la elaboración de este trabajo que establecer números cuánticos mayores que $n_x, n_y = 7$ alarga considerablemente el tiempo de computación.

Otras adaptaciones son necesarias sobre la expresión para α (Ec. 2.21):

- El volumen V es, en nuestro caso, infinito. La forma de lidiar con esto no es trivial, así que considere el lector lo siguiente. Para una onda plana en un cristal tridimensional, la densidad de estados en la primera zona de Brillouin viene dada por $g_k = V_{\text{red}}/(2\pi)^3$. El número total de estados será por tanto la integral sobre la 1^a ZB:

$$N_{\text{estados}} = g_k \int_{\text{ZB}} d^3\mathbf{k} = \frac{V}{(2\pi)^3} \times \frac{(2\pi)^3}{a^3} = \frac{V_{\text{red}}}{V_{\text{celda unidad}}} = N_{\text{celdas unidad}} \quad (3.1)$$

Es decir: la 1^a ZB contiene tantos estados como celdas unidad contiene nuestra red. He aquí el salto conceptual relevante: en nuestra discretización, hemos dividido la 1^a ZB en Q puntos ($Q \in \mathbb{N}$); por tanto, nuestro tratamiento del problema es totalmente equivalente a lidiar con una red que contiene Q veces la celda unidad. Así, el volumen *eficaz* de nuestra red viene dado por $V \rightarrow Q\Omega$, donde Ω es el volumen de nuestra celda unidad.

- La delta de Dirac, $\delta(E_f - E_i - \hbar\omega)$ no puede implementarse computacionalmente por motivos evidentes. La solución más inmediata es reemplazarla por una función ventana de anchura ΔE . Esto introduce una constante de normalización $1/\Delta E$ necesaria para que el resultado sea dimensionalmente correcto y el histograma no dependa de la resolución escogida.

4 Resultados

4.1 Modelo de Kronig-Penney 2D

Si bien el estudio de la estructura de bandas del sistema no constituye el objetivo último de este trabajo, resulta de suma importancia. Obtener correctamente la estructura de bandas y las funciones de onda asociadas a nuestra red de puntos cuánticos es imprescindible, y debe hacerse mediante un método que garantice tanto estabilidad numérica como la exactitud de los resultados. Así pues, expondremos aquí lo que obtenemos y lo compararemos con los resultados obtenidos por los autores del método [29] en su implementación (en MATLAB, definiendo estructuras de datos diferentes).

4.1.1 Estructura de bandas

Empezamos examinando lo esencial. La teoría nos dice que, para un sistema sin periodicidad, no tiene sentido pensar en una estructura de bandas. Es sólo cuando se establece un potencial periódico que las bandas empiezan a surgir. Examinamos si nuestro sistema exhibe este comportamiento aplicando el procedimiento descrito en la Sección 2.2.2 a tres casos particulares.

Antes de examinar los resultados, cabe aclarar el motivo por el que se han elegido ciertos valores para la profundidad del pozo de potencial. No existe en este apartado pretensión alguna de modelar un sistema físico concreto (p.e., puntos cuánticos de teluro de cadmio). Lo que buscamos es examinar los resultados arrojados por nuestro modelo para pozos de potencial con un tamaño equiparable al sistemas reales. Esto es, estudiamos pozos de unos pocos electronvoltios, que es la diferencia típica entre las afinidades electrónicas de dos medios materiales.



Fijando las dimensiones del punto cuántico, calculamos el espectro del sistema para tres pozos diferentes; en el primer caso, $V_0 = 0$; en ausencia de pozo tenemos electrones libres, de modo que deberíamos observar un continuo. Los dos casos que consideramos después, $V_0 = -2$ eV y $V_0 = -6$ eV, deben mostrar la aparición de una serie de bandas con energías prohibidas y permitidas.

Observamos que sucede lo previsto. En la Figura 2(a), vemos que para un electrón libre la energía forma un continuo, sin *gap*. Si hubiésemos calculado más bandas veríamos que éstas formarían un espectro continuo de energía. Sin embargo, en las Figuras 2(b) y 2(c) (respectivamente, $V_0 = -2$ eV y $V_0 = -6$ eV) hemos examinado un potencial no nulo, y por tanto se trata de una red periódica. Esto resulta en la aparición de una estructura de bandas, de las cuales observamos dos. Vemos que los estados ligados (con energías negativas) y los estados no ligados (con energías positivas) están separados por un intervalo de energías prohibidas. Esto resulta más evidente cuando el pozo de potencial es más profundo.

Aunque hemos comprobado visualmente la aparición de bandas, diagramas como el que acabamos de estudiar no son especialmente útiles. Una visualización más cómoda puede lograrse trazando un camino que recorra tres puntos de alta simetría de la primera zona de Brillouin, representando el perfil de las bandas a lo largo de dicho camino. Los tres puntos y sus respectivas coordenadas en el espacio recíproco son $\Gamma(0,0)$, $X(0,\pi/a)$ y $M(\pi/a,\pi/a)$. En la Figura 3 se ilustra el perfil de energía obtenido para dos casos particulares: $V_0 = 0$ y $V_0 = -3$ eV.

De nuevo, vemos que con $V_0 = 0$ no existe pozo, y por tanto no hay periodicidad alguna. Vemos que el espectro de energía no muestra ningún intervalo de energías prohibidas. Sin embargo, con $V_0 = -3$ eV, hemos introducido periodicidad en la

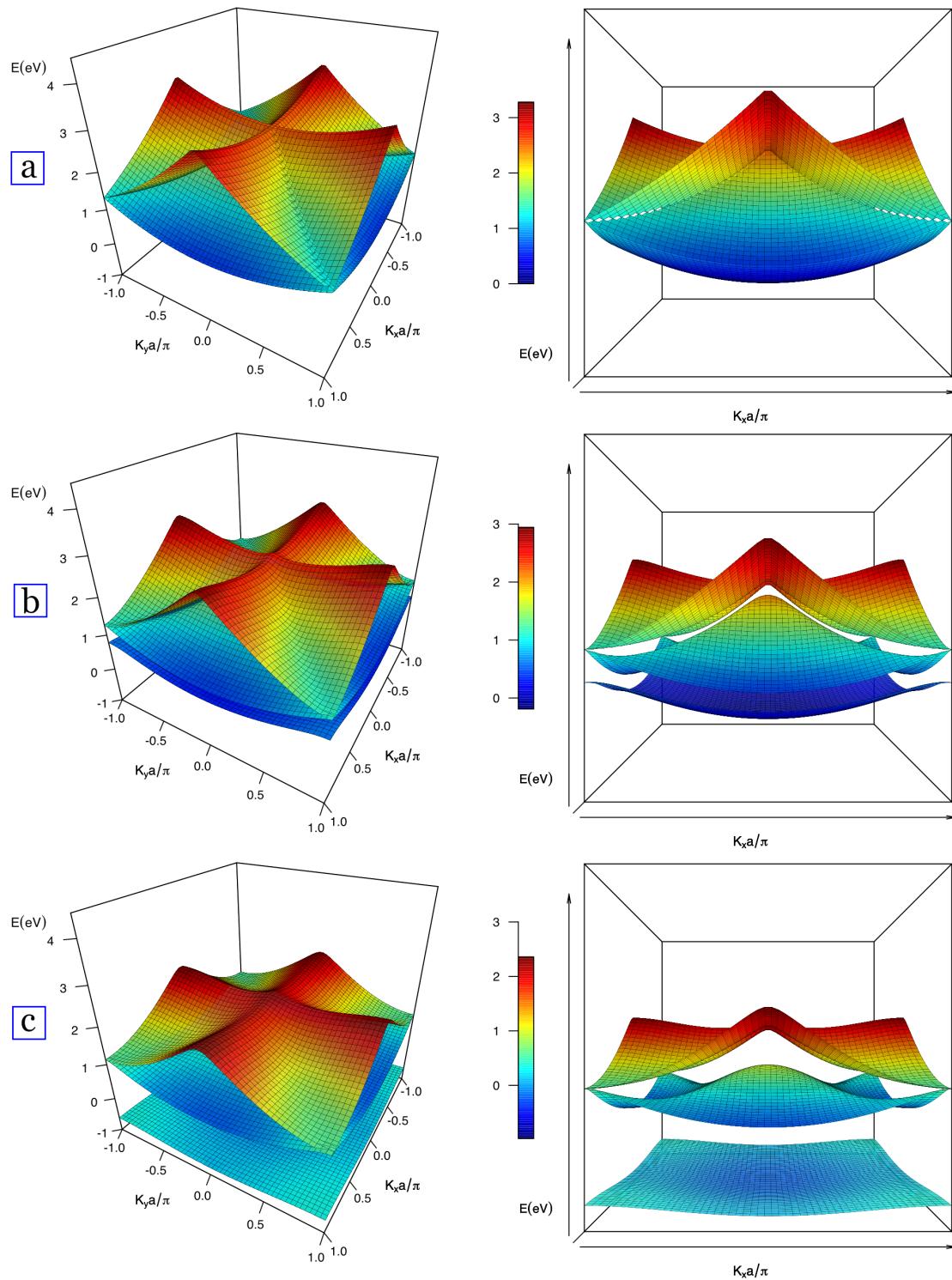


Figura 2: Estructura de bandas correspondiente a un sistema de puntos cuánticos para tres profundidades distintas de pozo. **(a)** $V = 0$ eV, un electrón libre, muestra un espectro continuo y sin gap. **(b)** $V = -2$ eV, el estado ligado (correspondiente a la banda inferior, con energías negativas) está separado mediante una banda de energías prohibidas de los estados superiores. **(c)** $V = -6$ eV, la banda prohibida es claramente visible; los dos estados no ligados (con energías positivas) forman un espectro continuo de energías.

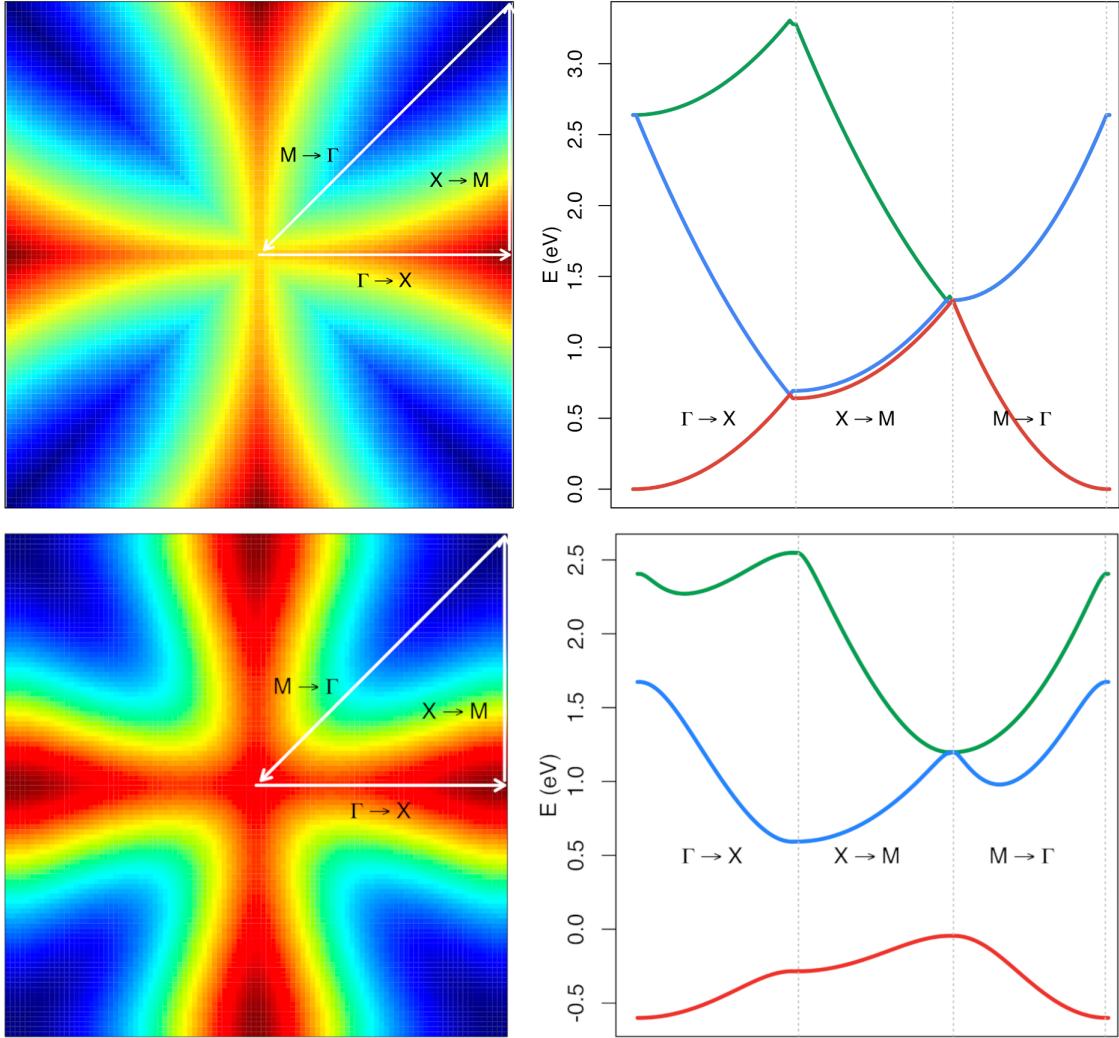


Figura 3: Secciones de la estructura de bandas para los casos en los que no hay pozo (arriba) y con un pozo periódico de $V_0 = -3$ eV (abajo). En la columna izquierda, la 1^a ZB con los puntos de alta simetría marcados. En la columna derecha, perfiles de energía a través del camino trazado.

red y vemos claramente que aparece un *gap*. Además de resultar en diagramas más claros, este método tiene el beneficio de ser suficientemente estándar en la literatura como para poder comparar resultados con otros autores. Podemos comprobar así que nuestros resultados concuerdan con los de los autores cuyo método hemos replicado [29]. Nótese que en su artículo se utiliza una unidad de energía definida por ellos mismos, E_{ISW} (de *infinite square well*, relacionada con la constante que aparece en la Ec. 2.30). Utilizando esta unidad e introduciendo los mismos parámetros que en su artículo, comprobamos que reproducimos a la perfección sus resultados; véase la Figura 4.

4.1.2 Funciones de onda

Además de obtener autovalores correctos, necesitaremos conocer la descomposición de las funciones de onda en la base utilizada. Esto es un cálculo directo.

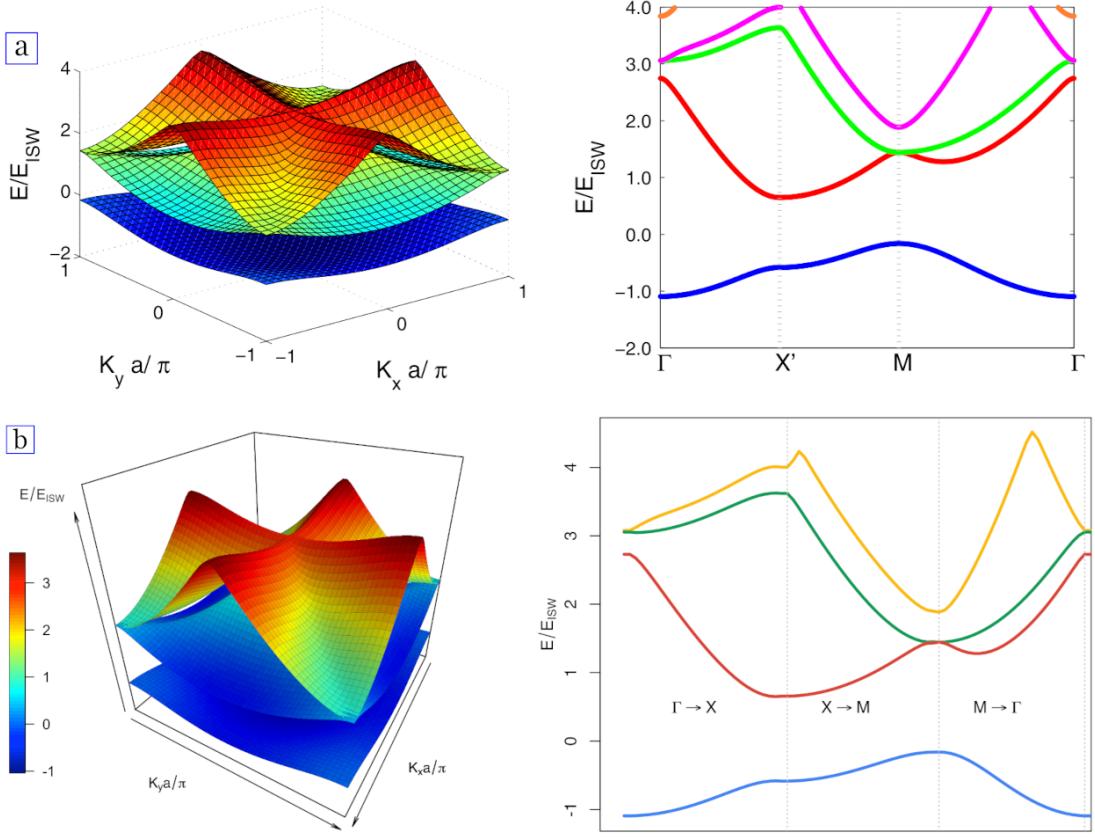


Figura 4: Comparativa. **(a)** Resultados publicados por los autores cuyo método implementamos [29]. **(b)** Resultados obtenidos en nuestra implementación del mismo algoritmo. Nos adaptamos a sus parámetros y unidades de energía para así poder comparar directamente.

Para cada punto del espacio recíproco, obtendremos los autovectores asociados al hamiltoniano numéricamente. En el caso del vector k -ésimo, sus entradas corresponderán a los coeficiente $b_k(n_x, n_y)$ y describirán al autoestado k -ésimo. Es posible hacer varias comprobaciones interesantes una vez se ha llevado a cabo este cálculo.

En la sección de Métodos se llevó a cabo una discusión sobre cuántos términos de la suma infinita deberíamos conservar para calcular correctamente las funciones de onda. Sin embargo, dicha discusión se apoya en argumentos computacionales, no físicos o de convergencia. Existe una forma de asegurarnos de que estamos obteniendo una buena representación de las funciones de onda *a posteriori*. El razonamiento es el siguiente:

1. Tomamos un punto cualquiera del espacio recíproco, p.e. $(K_x, K_y) = (0, 0)$, y calculamos el hamiltoniano para este punto.
2. Diagonalizamos el hamiltoniano, y obtenemos así los autoestados. El autoestado $|\psi_k\rangle$ corresponderá a la banda k -ésima y contendrá los coeficientes $b_k(n_x, n_y)$.

3. Para cada autoestado $|\psi_k\rangle$ disponemos sus coeficientes en un vector columna, v_k , ordenándolos según energías crecientes. Es decir, seguimos un esquema tal que la cantidad dada por $n_x^2 + n_y^2$ sea creciente.
4. Adjuntamos (por columnas) estos vectores, obteniendo una matriz: $A := (v_1, v_2, \dots, v_n)$.
5. Calculamos una nueva matriz, B , siendo cada elemento de ésta igual al cuadrado del módulo de cada elemento de A . Es decir, $b_{ij} = |a_{ij}|^2$.
6. Representamos gráficamente B para estudiar cómo se distribuyen los coeficientes no nulos.

El resultado puede consultarse en la Figura 5. Vemos que para los autoestados de

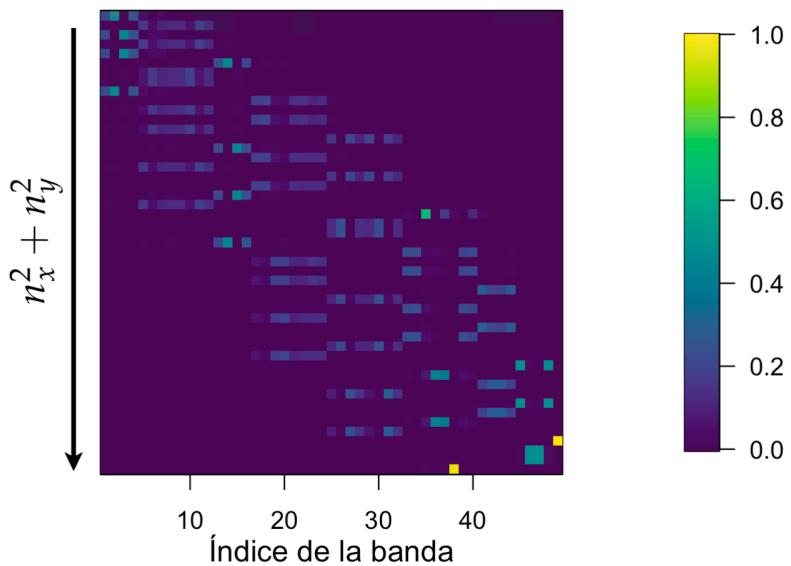


Figura 5: Visualización del módulo al cuadrado de los coeficientes $b(n_x, n_y)$ calculados. La columna k -ésima corresponde a la banda k -ésima. Los colores más claros corresponden a coeficientes con módulos mayores.

menor energía (las columnas de la izquierda), los coeficientes no nulos corresponden a números cuánticos (n_x, n_y) pequeños; la mayoría de los coeficientes calculados tienen módulo numéricamente igual a cero. Para los autoestados de mayor energía (las columnas a la derecha), observamos el caso complementario: los coeficientes asociados a números cuánticos pequeños son numéricamente iguales a cero; para números cuánticos mayores ($n_x, n_y \approx 7$) es cuando obtenemos coeficientes no nulos, $|b_{n_x, n_y}|^2 > 0$. Está claro que, según ésta gráfica, las bandas de mayor energía no han sido calculadas correctamente. Serían necesarios más coeficientes para describirlas bien.

La conclusión de éste cálculo es, en definitiva, que las primeras bandas de energía (las que usaremos) están correctamente calculadas. De hecho, con nuestro truncamiento llegamos a calcular correctamente las primeras 50 bandas, aproximadamente. Nuestros resultados son satisfactorios.

Otra comprobación interesante que podemos llevar a cabo es que las funciones de onda calculadas (sin el factor de Bloch) tienen norma unitaria. Es decir, cons-triñen el electrón a una celdilla unidad, como podía esperarse por la base elegida (Ec. 2.28). Lo podemos comprobar por integración numérica de $|\psi|^2$ en la celdilla unidad, o sumando el cuadrado de los coeficientes complejos calculados, un mé-todo más directo. En cualquier caso, obtenemos una probabilidad numéricamente idéntica a la unidad (con la primera desviación teniendo lugar en el decimal deci-moqueinto en el peor de los casos).

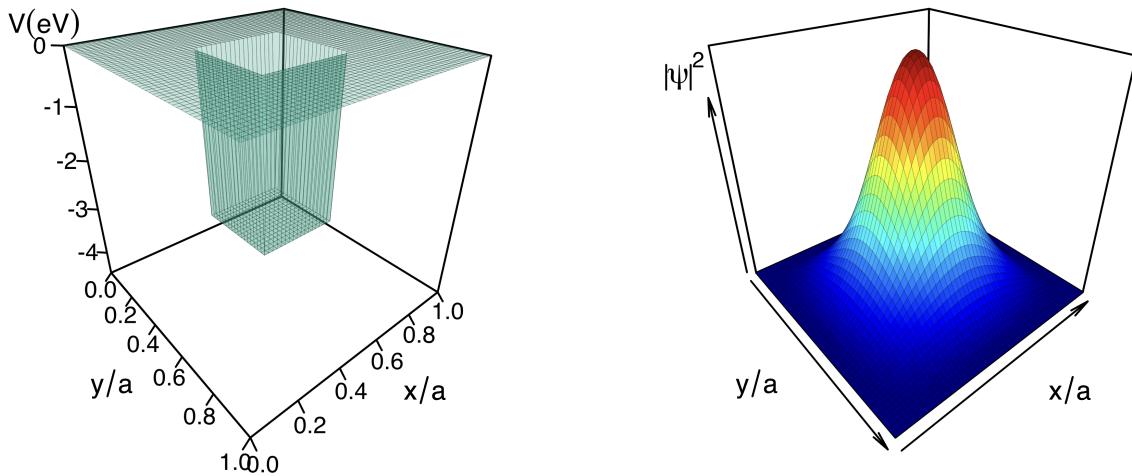


Figura 6: Ejemplo ilustrativo. Para un sistema cuya celdilla unidad contiene un pozo cuadrado como el de la izquierda, encontramos que la densidad de probabilidad corresponde a la figura de la derecha.

Los autores del artículo en el que nos basamos apuntan a un resultado interesante: las densidades de probabilidad conservan la simetría del pozo utilizado. Así, un pozo *coulombiano* resulta en funciones de onda con simetría polar, mientras que un pozo cuadrado resulta en funciones de onda con simetría cuadrada. Pode-mos comprobar que esto también se cumple en nuestra implementación. Aunque con la función de onda correspondiente a la primera banda no es inmediatamente aparente, con las siguientes funciones de onda se puede comprobar a simple vista que es así. Véase, para ello, la Figura 7.

Esto no es una mera curiosidad. Como se apunta en el artículo de Pavelich y Marsiglio [29], la simetría cuadrada de nuestras funciones de onda introduce una dirección "preferencial". Esto tiene implicaciones importantes sobre la estructura de bandas del sistema cuando la red según la cual se disponen los puntos cuán-ticos no es cuadrada. Dado que no es nuestro caso, no profundizaremos más en este aspecto, pero es interesante tener presente que la red de Bravais escogida pa-ra modelar nuestro sistema influye la estructura de bandas, y que estos resultados son válidos para una red cuadrada.

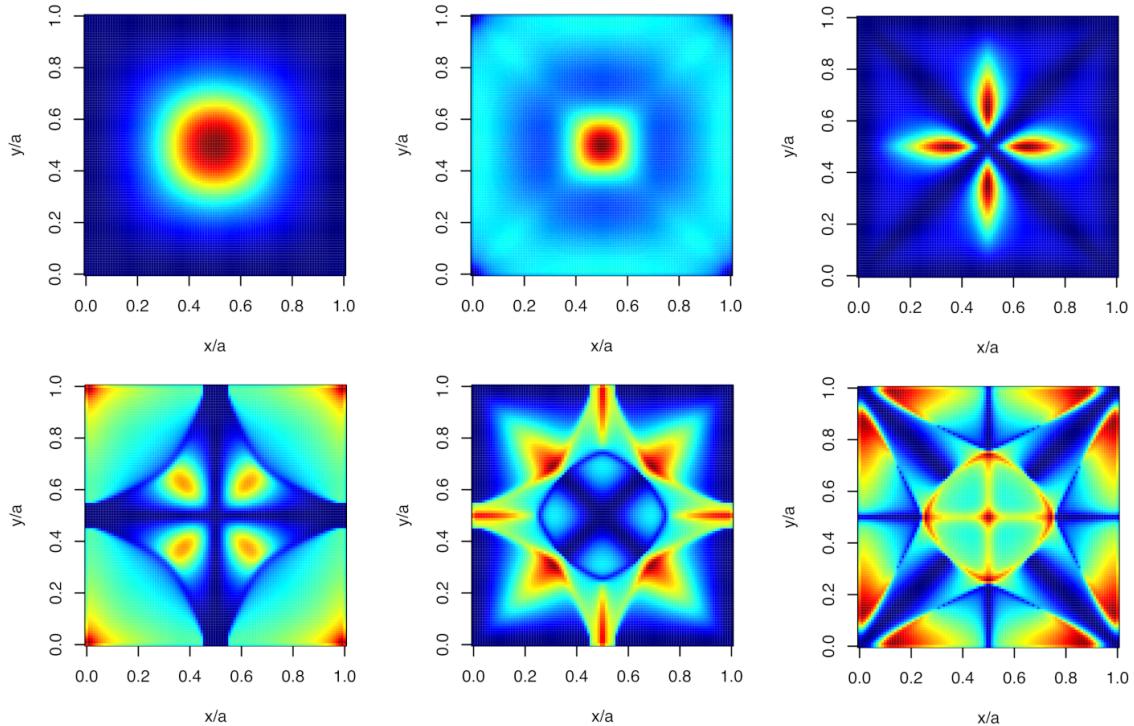


Figura 7: Densidades de probabilidad correspondientes a las seis bandas de menor energía. Obsérvese que se conserva la simetría del pozo original.

4.2 Cálculo de α

4.2.1 Comentarios preliminares

A lo largo de este apartado estudiaremos cómo los parámetros más relevantes que definen nuestro sistema influyen su capacidad de absorber fotones. Nos centraremos sobre todo en aquellos parámetros que podrían controlarse experimentalmente y no tanto en los que son intrínsecos a un material dado. Estos parámetros son:

1. La distancia entre puntos, también conocida en la literatura como *interdot distance*, es equiparable a la constante de red¹. Es uno de los pocos parámetros que se pueden modificar a voluntad cuando se fabrica una red de puntos cuánticos, de modo que es interesante conocer cómo influye en α .
2. Un punto cuántico puede ocupar un espacio variable dentro de la celdilla unidad. Aquellos de menor tamaño estarán separados por una distancia mayor de sus vecinos más próximos; por contrapartida, puntos cuánticos de mayor tamaño estarán más cerca de sus vecinos. Comprobamos así que la constante de red no es el único parámetro necesario para describir nuestro

¹Para una red bidimensional y como la que estudiamos, el parámetro de red a está bien definido en las dos dimensiones coincidentes con la red, pero no en la dimensión perpendicular a ésta. Durante el desarrollo de este trabajo hemos conceptualizado cada celdilla unidad como un cubo de lado a , siendo a el parámetro de la red bidimensional, pero esto constituye en realidad un abuso del lenguaje. Por ello es preferible hablar aquí en términos de la *interdot distance*, que no da lugar a equívocos.

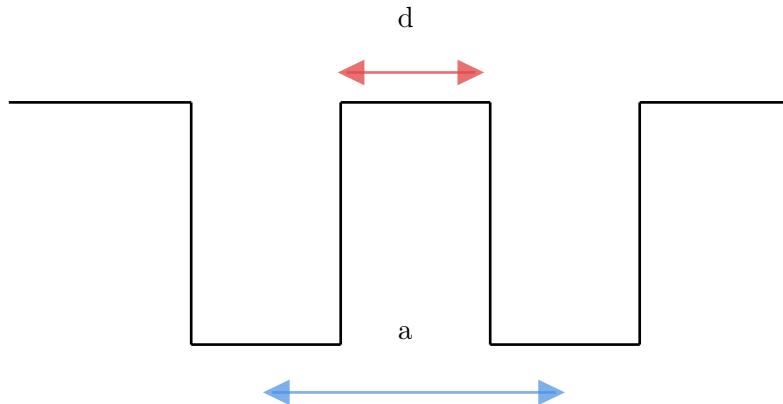


Figura 8: Representación esquemática de la distancia entre puntos, o *interdot distance* (a) y la separación entre puntos, o *dot-to-dot distance* (d).

sistema. Introducimos un segundo parámetro, la separación entre puntos, conocido en la literatura como *dot-to-dot distance*. Para ver una representación gráfica, véase la Figura 8. Estudiaremos la influencia de este parámetro en la absorción.

3. La temperatura. La estadística de Fermi-Dirac (Ec. 2.33) que gobierna la probabilidad de ocupación de cada estado depende tanto del nivel de Fermi como de la temperatura. A temperaturas bajas es prácticamente una función escalón, pero al subir la temperatura se asemeja a un sigmoide en el entorno del nivel de Fermi. Examinaremos la influencia de esto sobre la absorción de fotones.
4. La profundidad del potencial. Este parámetro depende principalmente del material escogido. Conocer cómo influye en α nos puede ayudar a escoger el material más adecuado.

Por otra parte, la interpretación de los resultados requiere aplicar siempre la misma lógica, pero ésta no es trivial. Para no perder al lector en particularidades es conveniente revisar brevemente cómo interpretamos un resultado típico, antes de pasar a examinar casos más particulares. En general, los resultados que obtendremos pueden entenderse en relación a la estructura de bandas del sistema. La estructura de bandas no se añadirá (por motivos de espacio y claridad) durante los siguientes apartados, así que mostramos aquí un ejemplo típico a modo ilustrativo (Figura 9). Los histogramas de α calculados tienen una serie de características comunes:

- Dado que establecemos el nivel de Fermi (μ) entre la primera y la segunda banda, la diferencia de energía entre éstas será el *gap* (E_{gap}) del sistema. Por tanto, si existe este gap, encontraremos un intervalo igual de amplio en el que no se da absorción.
- Encontraremos un rango de energía en el que se da absorción, que puede ser tan amplio como el rango de energía abarcado por las dos bandas calculadas.

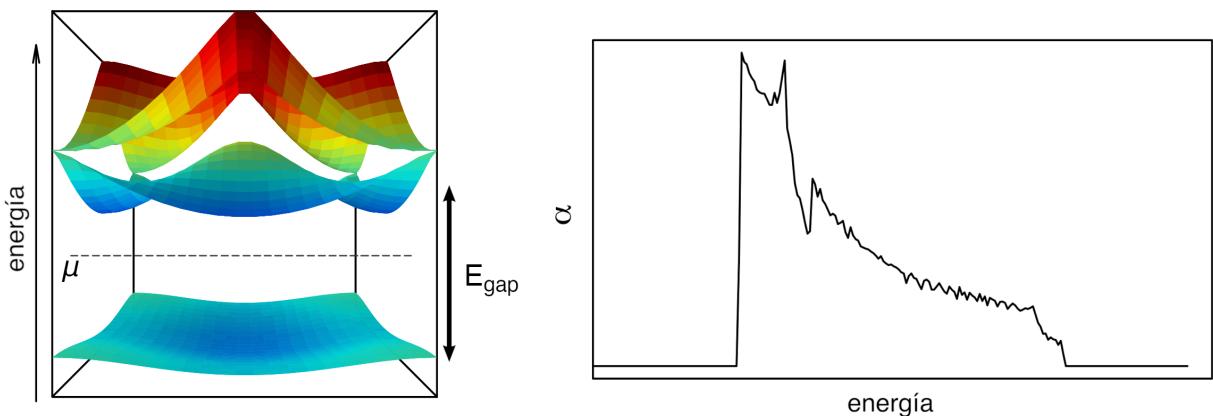


Figura 9: Ejemplo esquemático de un resultado típico: estructura de bandas y coeficiente de absorción resultante.

- En la Fig. 9 se observa una única banda de conducción, que para cada punto del espacio recíproco tiene un límite inferior (color azul) y un límite superior (color rojo). En general, es posible observar en el histograma de α de forma aproximada qué absorciones corresponden al límite inferior (izquierda, mayor absorción) y cuáles al límite superior (derecha, menor absorción). Todas estas absorciones pertenecen a la primera banda de conducción.
- Si hay estados disponibles en la banda de conducción, existe la posibilidad de que un electrón promocione para ocuparlos, y por tanto la absorción es posible. Si la densidad de estados en la banda de conducción es baja, no pueden darse absorciones. Esto implica una relación directa entre la estructura de bandas y la absorción: bandas más planas nos darán absorciones más concentradas en un rango de energías estrecho.

Con estos puntos en mente, procedemos a estudiar cada uno de los parámetros interesantes.

4.2.2 Influencia de la distancia entre puntos

Observando la expresión analítica de los autovalores en nuestra base (Ec. 2.30) es posible entender intuitivamente cómo influye la distancia entre puntos en el espectro de energías del sistema; éste crece de forma proporcional a $1/a^2$. Dado que para la temperatura que consideramos en este estudio ($T = 300$ K) la distribución de Fermi-Dirac es prácticamente una función escalón, las bandas de conducción estarán despobladas y un electrón dado no encontrará impedimento alguno para promocionar a un nivel superior, si dispone de la energía necesaria. Por tanto, intuitivamente, incrementar la distancia entre puntos resultará en que el rango de energías disponibles a las que promocionar será mayor, y el histograma que calculamos tendrá mayor rango en el eje de abscisas. Podemos comprobar esta afirmación computacionalmente. En la Figura 10 pueden consultarse los resultados de cuatro simulaciones que mantienen todos los parámetros de la simulación

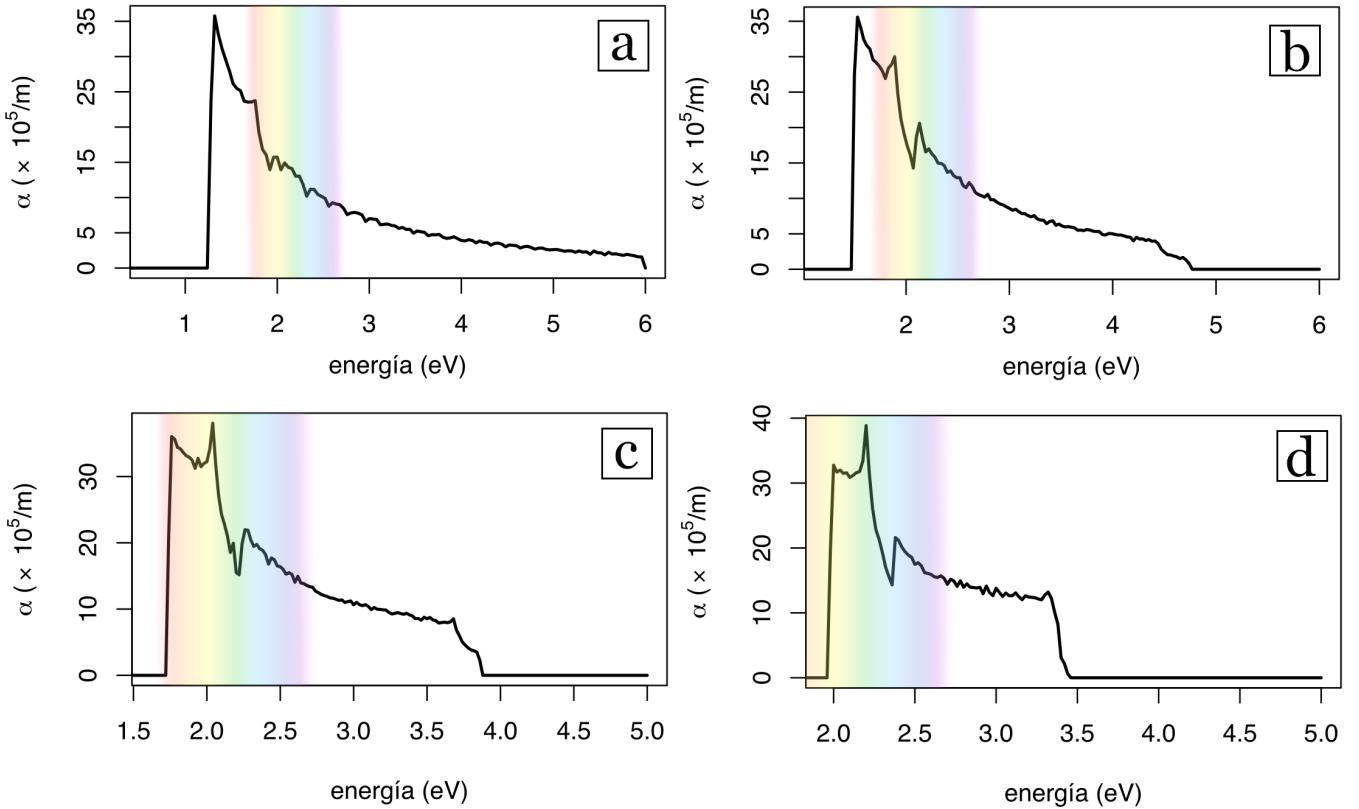


Figura 10: Coeficiente de absorción para cuatro valores de *interdot distance*; (a) $a = 1.0 \text{ nm}$, (b) $a = 1.2 \text{ nm}$, (c) $a = 1.4 \text{ nm}$, (d) $a = 1.6 \text{ nm}$. Se mantienen constantes la geometría y la profundidad del pozo ($V_0 = -5 \text{ eV}$), que se ha elegido para que el potencial aparezca cerca del espectro visible y así tenerlo como referencia.

constantes, cambiando únicamente la distancia entre puntos.

Comprobamos que el esbozo anterior es cierto. Se revelan otros detalles, que pueden explicarse fácilmente en el contexto de la teoría de bandas.

- Para valores de a menores, las bandas de conducción se solapan y comprenden un rango amplio de energías. Por tanto, el coeficiente de absorción tomará valores en dicho intervalo, resultando en un sistema que puede absorber fotones con frecuencias muy distribuidas en el espectro electromagnético. Compruébese que esto es cierto observando las gráficas de la fila superior de la Fig. 10. Para los parámetros seleccionados, sólo dos de las configuraciones ($a = \{1.4, 1.6\} \text{ nm}$) tienen picos de absorción bien centrados en el espectro visible.
- Para valores de a mayores, las bandas de conducción se aplanan, toman energías menores y se solapan menos. Esto se traduce, respectivamente, en que observaremos absorción de fotones en un intervalo más pequeño, para frecuencias menores, y con una mayor diferenciación de los picos de absorción. Esto puede comprobarse en la fila inferior de la Fig. 10: entre los 2.0 y los 2.5 eV observamos un mínimo, el cual corresponde al rango de energías entre la primera y la segunda banda de conducción para las cuales hay una menor

densidad de estados.

4.2.3 Influencia de la separación entre puntos

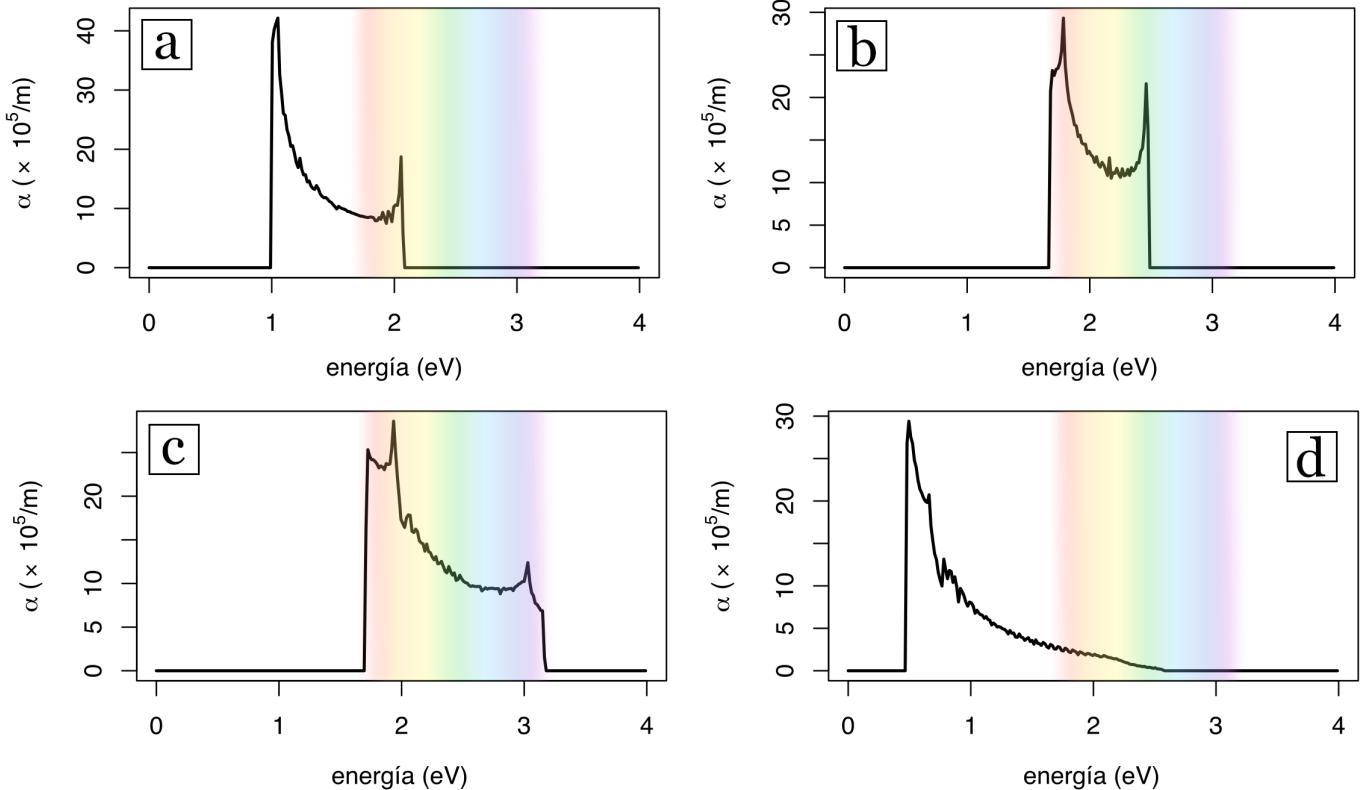


Figura 11: Coeficiente de absorción para cuatro valores de *dot-to-dot distance*; (a) $d/a = 0.2$, (b) $d/a = 0.4$, (c) $d/a = 0.6$, (d) $d/a = 0.8$. Se añade el espectro visible como referencia. Se mantienen constantes la distancia entre puntos ($a = 1.6$ nm) y la profundidad del pozo ($V_0 = -5$ eV).

La tendencia no es tan clara en este caso. En primer lugar, observemos que la separación está acotada por el tamaño de la celdilla unidad: no puede haber dos puntos contiguos separados, por ejemplo, por dos constantes de red. Por tanto, nos será más fácil pensar en términos de d/a (es decir, la separación entre puntos en relación a la celda unidad). En la Figura 11 observamos que el máximo de absorción de fotones tiende a desplazarse hacia energías superiores cuando el punto cuántico ocupa una fracción no despreciable de la celda unidad, acercándose al visible en este caso. Cuando un punto cuántico es muy grande, ocupando casi toda la celda unidad (abajo a la derecha) o muy pequeño, ocupando una fracción minúscula de ésta (arriba a la izquierda), el máximo se desplaza hacia energías menores.

Cuando contemplamos los casos extremos ($d/a = 0$ y $d/a = 1$), imaginamos un sistema en el cual el pozo de potencial es inexistente o lo ocupa todo. Tal configuración no tiene sentido, pues de darse esto no encontraremos ningún tipo de periodicidad. Estamos obligados a contemplar valores más razonables para la separación entre puntos. Para tales valores —como $d/a = \{0.4, 0.6\}$ en la Figura

11— vemos que la anchura del espectro de absorción puede modularse fácilmente para que coincida con un rango semejante al del espectro visible.

4.2.4 Influencia de la temperatura

La temperatura aparece en la distribución de Fermi-Dirac (Ec. 2.33). A temperaturas bajas, dicha distribución tiene forma de función escalón, y solo al aumentar la temperatura comenzamos a ver cambios alrededor del nivel de Fermi, donde la función se suaviza (Fig. 12). El factor que aparece en la definición de α (Ec. 2.21) es $(f_i - f_f)$, y éste se irá haciendo más pequeño para temperaturas mayores.

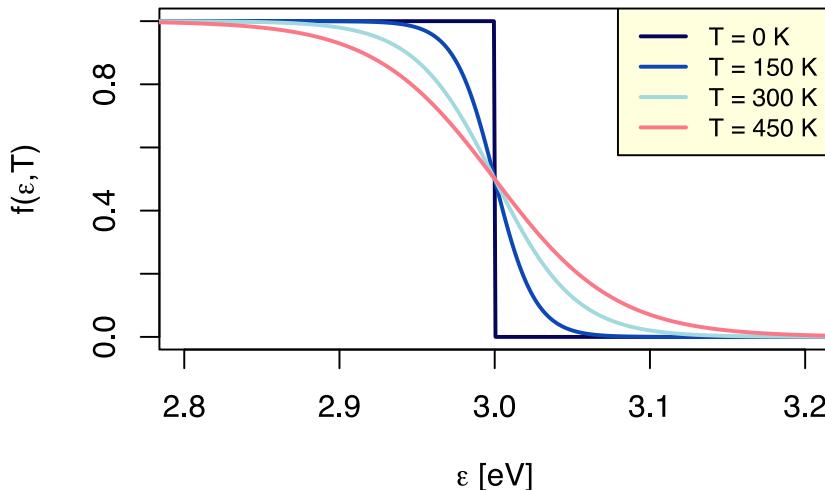


Figura 12: Distribución de Fermi-Dirac. Obsérvese cómo la distribución se suaviza en torno al nivel de Fermi (fijado aquí en $\mu = 3$ eV) al subir la temperatura.

Dado que estamos estudiando una posible aplicación fotovoltaica de la tecnología de puntos cuánticos, no ha de perderse de vista el régimen de uso de nuestro hipotético dispositivo. A temperaturas cercanas a la ambiente, e incluso a temperaturas mucho mayores (p.e., $T \approx 100^\circ\text{C}$), la distribución de Fermi se suavizará en el intervalo de energías $[\mu - 0.2, \mu + 0.2]$ eV, aproximadamente. Como estamos situando el nivel de Fermi en el centro del *gap*, que numéricamente se mide en el rango $E_{\text{gap}} \in [0.2, 0.4]$ eV, el efecto de la temperatura será despreciable. Esto es algo beneficioso; en términos de absorción, el comportamiento del dispositivo es estable ante cambios de temperatura. Cualquier otro efecto de la temperatura en el sistema no forma parte del alcance del presente trabajo.

4.2.5 Influencia del potencial

Ya vimos anteriormente (Fig. 2) algunas maneras en que la profundidad del potencial modifica la estructura de bandas del sistema.

- Para pozos más profundos obtenemos *gaps* más amplios. Es de esperar, por tanto, que al aumentar la profundidad del pozo de potencial observemos espectros de absorción desplazados hacia energías mayores.
- Para pozos más profundos, observamos bandas de energía más compactas. Al contraerse las bandas, los electrones pueden promocionar en un rango de energías más reducido. Por tanto, al aumentar la profundidad del pozo esperamos observar espectros de absorción menos dispersos.

Ambas tendencias quedan confirmadas en la Figura 13.

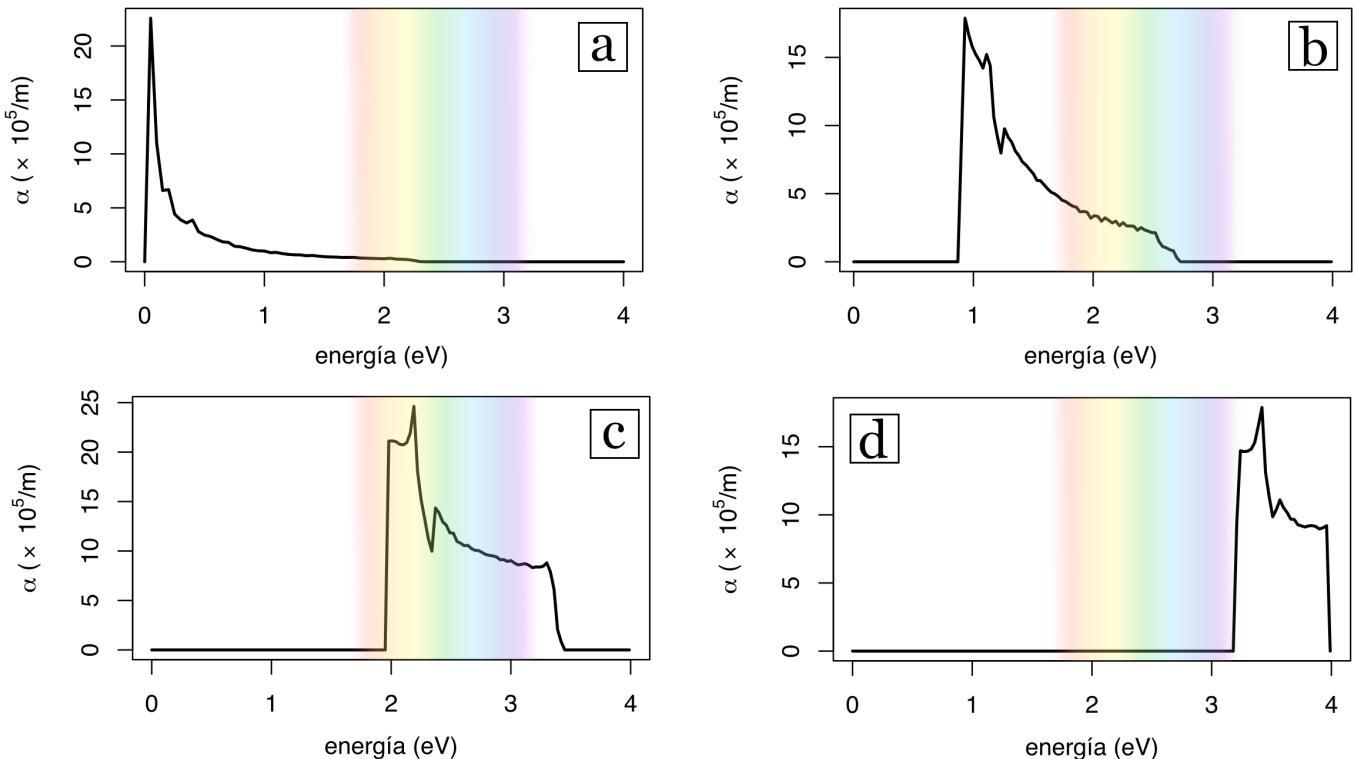


Figura 13: Coeficiente de absorción para cuatro pozos de potencial de diferente profundidad; (a) $V_0 = -0.5 \text{ eV}$, (b) $V_0 = -3 \text{ eV}$, (c) $V_0 = -5 \text{ eV}$, (d) $V_0 = -7 \text{ eV}$. Se añade el espectro visible como referencia. Se mantienen constantes la constante de red y la geometría del pozo ($a = 1.6 \text{ nm}$, $d/a = 0.67$).

4.3 Estimación de parámetros óptimos

Durante las secciones anteriores hemos impuesto una serie de parámetros, y después hemos calculado el espectro de absorción asociado a cada conjunto de parámetros. Esto implica que, computacionalmente, hemos tratado α como una función de las variables físicas que definen nuestro sistema: V_0 , a y d . Estamos lidian- do, entonces, con una función $\alpha := \alpha(\hbar\omega; V_0, a, d)$; este es el motivo por el cual no se ha llevado a cabo ningún ajuste numérico de la dependencia de α con los parámetros del sistema. Realizar un ajuste de α frente a una variable sólo nos proporcionaría información sobre la absorción del sistema con el resto de parámetros

fijados en valores concretos. Necesitamos un enfoque algo más sofisticado si queremos obtener, en definitiva, conclusiones de carácter numérico del trabajo que hemos realizado.

El objetivo de este proyecto es encontrar la manera de derivar la mayor cantidad de energía posible de la luz del sol. Es decir, necesitamos que el espectro de irradiancia del sol y el espectro de absorción de nuestra red se solapen lo máximo posible. Esto no es más que un problema de ajuste. Necesitamos ajustar una serie de datos (el espectro de irradiancia solar) a la función $\alpha(\hbar\omega; V_0, a, d)$. Existen multitud de métodos para hacer esto, como el algoritmo de Gauss-Newton, que suele venir implementado en la mayoría de librerías de análisis de datos. Podemos seguir el siguiente razonamiento:

1. Dispondremos de un espectro de irradiancia solar. Un espectro estándar utilizado con frecuencia en aplicaciones fotovoltaicas es el ASTM Standard Extraterrestrial Spectrum Reference E-490, abreviado como ASTM E-490 [32].
2. Este espectro representa la irradiancia del sol (la potencia emitida por unidad de superficie y para cada longitud de onda), de modo que necesitaremos modificar α para que el eje de abscisas represente la longitud de onda del fotón.
3. Normalizaremos ambos espectros para que su máximo sea la unidad, trabajando con unidades arbitrarias.
4. Llevaremos a cabo un ajuste de la función $\alpha = \alpha(\hbar\omega; V_0, a, d)$, siendo los parámetros $\{V_0, a, d\}$ aquellos que variaremos para encontrar un ajuste óptimo.

El resultado de este procedimiento se recoge en la Figura 14.

Un ajuste óptimo de nuestro espectro de absorción al espectro de irradiancia solar se consigue para una constante de red de $a = 1.61$ nm; una separación entre puntos cuánticos de $d = 0.99$ nm; y un potencial de $V = -5.02$ eV. Notamos enseguida dos cosas:

- Se consigue un ajuste adecuado dentro del espectro visible, pero no se logran aprovechar las longitudes de onda largas que también emite el sol. Esto no es un fallo de nuestro modelo, y de hecho la explicación es inmediata. Las longitudes de onda mayores corresponden a fotones de menor energía. En nuestro caso, estamos lidiando con una red de puntos cuánticos que exhibe una banda prohibida (Fig. 2). Por tanto, los fotones han de tener una energía mínima (equivalentemente, una longitud de onda máxima) para ser capaces de excitar algún electrón. Si se disminuye el potencial asociado a cada punto cuántico hasta que el *gap* desaparece, podemos absorber fotones de onda larga, pero el resultado es que el pico de absorción se desplaza hacia energías mayores (Fig. 13). La propia física del sistema limita en qué medida se puede aprovechar la energía solar.
- Este ajuste no es único. Evidentemente, la función $\alpha = \alpha(\hbar\omega; V_0, a, d)$ tendrá una forma complicada y difícil de visualizar. El resultado aquí obtenido

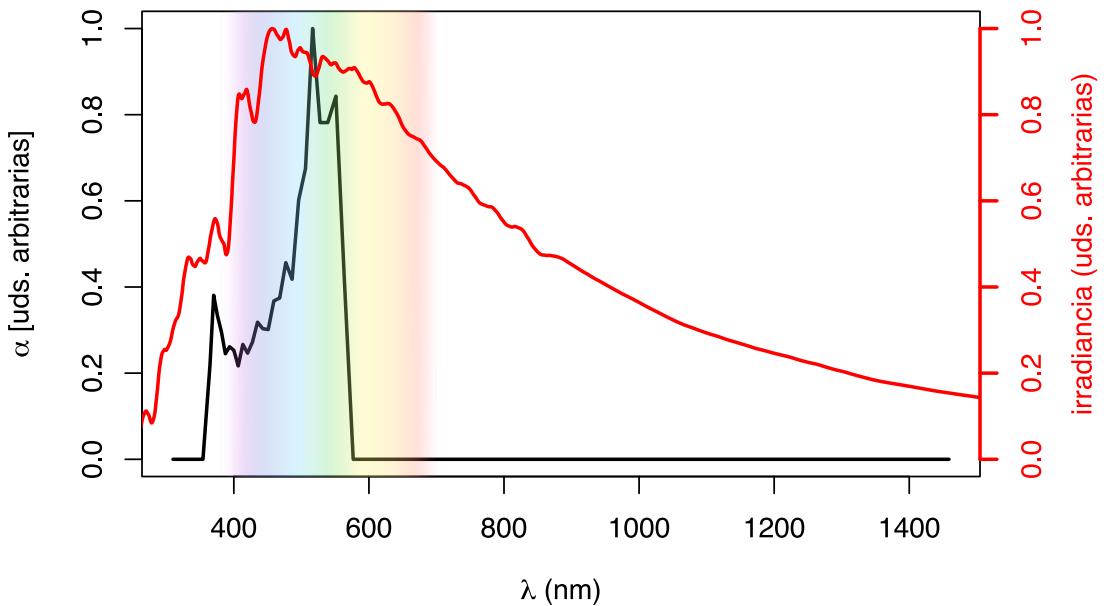


Figura 14: Uno de los posibles ajustes del espectro de absorción al espectro de irradiancia solar.

requiere, como todo ajuste numérico, de una estimación razonable de los valores iniciales de los parámetros a ajustar. Es posible que existan otras configuraciones que maximicen la absorción, y de hecho puede que sea deseable estudiarlas en función de las limitaciones experimentales.

5 Conclusiones

En el presente trabajo se han llevado a cabo los cálculos que permiten conocer la estructura de bandas de una red de puntos cuánticos. Para ello se han utilizado diversas simplificaciones. Entre ellas, contamos con la geometría de los pozos de potencial (cuadrados, en lugar de *coulombianos* o con un potencial realista); la geometría de la propia red (cuadrada, sin contemplar otras redes de Bravais); la aproximación de dipolo, que nos permite simplificar el hamiltoniano de interacción (Ec. 2.11); la aproximación de envolvente lenta, pues sin ella las integrales recogidas en la Ec. 2.32 se vuelven muy complicadas; de carácter numérico, como el truncamiento de la suma infinita asociada a las funciones de onda; y algunas más, las cuales se han mencionado a lo largo del texto. Por ello, los resultados a los que llegamos han de entenderse en el marco de esta simplificación. No resultan de gran importancia las cifras específicas que se han alcanzado, sino la comprensión que derivamos de la física subyacente a un sistema tan complejo.

Se ha alcanzado a comprender cómo el tamaño y la disposición de los puntos cuánticos, así como el pozo de potencial asociado a éstos, influyen en la estructura de bandas del sistema y consecuentemente, en la capacidad de éste de absorber fotones. A grandes rasgos, concluimos:

1. A la hora de construir una célula solar de banda intermedia, no hay una sola configuración que optimice la absorción de fotones. Pueden hallarse diferentes combinaciones de parámetros que resulten en una buena absorción, y la más deseable dependerá de los retos técnicos y de las propiedades intrínsecas de los materiales disponibles.
2. La distancia entre puntos (a) equiparable al parámetro de red, define en gran medida la anchura del espectro de absorción. Valores mayores de a resultan en la absorción de fotones de energías predominantemente bajas. Se observa que, para los parámetros examinados en este trabajo, los valores que resultan en una absorción más cercana al espectro visible están en el entorno de los 1-2 nanómetros (Fig. 10).
3. La separación entre puntos (d), que es la menor distancia entre el límite de un pozo cuadrado el adyacente, tiene una influencia más complicada (Fig. 11). Éste valor está acotado por la distancia entre puntos, pues un pozo no puede estar más alejado del adyacente por más de una constante de red. Para valores extremos (es decir, $d = a$ y $d = 0$) se pierde la periodicidad, y no se da absorción. Observamos que la absorción se desplaza hacia energías mayores para valores intermedios ($d \sim a/2$).
4. La profundidad del pozo de potencial asociado a cada punto cuántico define en gran medida qué energías se van a absorber (Fig. 13). Para pozos poco profundos, el sistema no exhibe un *gap*, de modo que se pueden absorber fotones de una energía arbitrariamente baja, pero esto no es inútil. Para pozos con una profundidad tal que $V_0 = [-3, -5]$ eV, la absorción tiene lugar en el espectro visible. Para pozos más profundos, la absorción tiene lugar más allá del ultravioleta, y el espectro de absorción se vuelve estrecho debido al aplandamiento de las bandas de energía.
5. La temperatura no tiene un papel importante en nuestra aproximación al problema. Esto se debe a que hemos colocado arbitrariamente el nivel de Fermi en el centro del *gap*. Dado que a temperaturas cercanas a la ambiente la temperatura sólo modifica la distribución de Fermi-Dirac en el entorno del nivel de Fermi, no observamos efectos apreciables.

Por otra parte, se lleva a cabo un ajuste del espectro de absorción al espectro de irradiancia solar. Se varían los parámetros que definen la red aplicando un descenso de gradiente en combinación con el algoritmo de Gauss-Newton. El resultado es que se halla *un mínimo* (Fig. 14). Este corresponde a una constante de red de $a = 1.61$ nm; una separación entre puntos cuánticos de $d = 0.99$ nm; y un potencial de $V = -5.02$ eV. Observamos computacionalmente que este mínimo no es único, pues depende de la estimación inicial que proporcionemos para los parámetros. Experimentalmente podría ser deseable explorar otras combinaciones de parámetros.

En la actualidad ya es posible producir redes de puntos cuánticos próximas en características a lo aquí descrito. Nuestra estimación indica que los puntos cuánticos pueden ser utilizados, quizá sin grandes avances en su manufactura, en aplicaciones fotovoltaicas.

6 Agradecimientos

Tras unos años formando parte de la comunidad universitaria es fácil olvidar que estar aquí supone un enorme privilegio. Me gustaría dedicar unas palabras de agradecimiento a las personas que, de un modo u otro, han allanado el tortuoso pero gratificante camino que ha sido convertirme en físico.

- A Sara, Nacho y Cris, por tantas tardes juntos.
- A Lola, cuya amistad floreció en el escenario más inverosímil: una clase de física de partículas.
- A Dalia, amiga queridísima y siempre presente.
- A Alberto, Julio, Arturo, Sanfru, Belén, Pedro Luis y el resto del grupo. Sois muchos y solo me queda media página.
- A Francisco, mi tutor, que ha guiado cada paso de este trabajo y sin cuya inestimable ayuda no habría pasado del título.
- A los empleados de la cafetería «Mundi»: Carlos, Salva y Susi. Hasta pronto, y gracias por las tostadas.
- A mis padres, Manolo y Filomena, de cuyas trabajadas manos soy en gran parte responsable. Gracias por darme oportunidades que vosotros no tuvisteis.
- A D. Christian Haarkötter, BSc., MSc., PhD., etc., que sin duda apreciará que los agradecimientos estén formateados como una lista. Eternamente agradecido de tenerte como amigo.
- Y sobre todo a Paula, que ha convertido estos años en un regalo que atesoraré siempre.

Gracias a todos.

Referencias

- [1] K. F. Myers, P. T. Doran, J. Cook, J. E. Kotcher y T. A. Myers,
Consensus revisited: Quantifying scientific agreement on climate change and climate expertise among Earth scientists 10 years later,
Environmental Research Letters **16** (2021) 104030,
<https://doi.org/10.1088/1748-9326/ac2774>.
- [2] M. Lynas, B. Z. Houlton y S. Perry,
Greater than 99 % consensus on human caused climate change in the peer-reviewed scientific literature,
Environmental Research Letters **16** (2021) 114005,
<https://doi.org/10.1088/1748-9326/ac2966>.
- [3] *Informe de Energía Renovable 2021*,
 Sistema Eléctrico Español (2021) [enlace]. Consultado el 15 de mayo de 2024.
- [4] A. Richter, M. Hermle y S. W. Glunz,
Reassessment of the limiting efficiency for crystalline silicon solar cells,
IEEE Journal of Photovoltaics **3** (2013) 1184–1191,
<https://doi.org/10.1109/jphotov.2013.2270351>.
- [5] W. Shockley y H. J. Queisser,
Detailed balance limit of efficiency of p-n junction solar cells,
J. Appl. Phys. **32** (1961) 510–519,
<https://doi.org/10.1063/1.1736034>.
- [6] F. Montanarella y M. V. Kovalenko,
Three millennia of Nanocrystals,
ACS nano (2022),
<https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC9046976/>.
- [7] A. I. Ekimov y A. A. Onushchenko
Quantum size effect in three-dimensional microscopic semiconductor crystals,
Jetp Lett. **34** (1981) 345,
<http://dx.doi.org/10.1134/S0021364023130040>.
- [8] A. I. Ekimov y A. A. Onushchenko,
Quantum size effect in the optical-spectra of semiconductor micro-crystals,
Sov. Phys. Semicond. **16** (1982) 775–778,
- [9] A. L. Efros,
Interband absorption of light in a semiconductor sphere,
Sov. Phys. Semicond. **16** (1982) 772–775.
- [10] R. Rossetti, S. Nakahara y L. E. Brus,
Quantum size effects in the redox potentials, resonance Raman spectra, and electronic spectra of CdS crystallites in aqueous solution,
The Journal of Chemical Physics **79** (1983) 1086–1088,
<https://doi.org/10.1063/1.445834>.
- [11] Press release,
 NobelPrize.org. Nobel Prize Outreach 2023, Wed. 4 Oct 2023,
<https://www.nobelprize.org/prizes/chemistry/2023/press-release/>.
- [12] M. A. Reed, J. N. Randall, R. J. Aggarwal, R. J. Matyi, T. M. Moore y A. E. Wetsel,
Observation of discrete electronic states in a zero-dimensional semiconductor nanostructure,
Phys. Rev. Lett. **60** (1988) 535–537,
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.60.535>.
- [13] A. Luque López, A. Martí Vega y C. Stanley,
Understanding intermediate-band solar cells,
Nature Photonics **6** (2012) 146–152,
<https://doi.org/10.1038/nphoton.2012.1>.
- [14] A. Luque y A. Martí,
Increasing the efficiency of ideal solar cells by photon induced transitions at intermediate levels,
Phys. Rev. Lett. **78** (1997) 5014–5017,
<https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.78.5014>.
- [15] S. S. Oluyamo, A. A. Faremi, O. I. O. Olusola e Y. A. Odusote,
Tunability of conductivity type and energy band gap of CdTe thin film in the electrodeposition technique,
Materials Today: Proceedings **38** (2021) 558–563,
<https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.02.962>.
- [16] P. A. M. Dirac,
The Quantum Theory of Emission and Absorption of Radiation,
Proceedings of the Royal Society A **114** (1927) 243–265,
<https://doi.org/10.1098/rspa.1927.0039>.
- [17] T. D. Visser,
Whose golden rule is it anyway?,
American Journal of Physics **77** (2009) 487,
<https://doi.org/10.1119/1.3096649>.
- [18] S. L. Chuang,
Physics of Photonic Devices,

- 2nd ed., Wiley (2009), Chapter 9, Section 1, pp. 349–352.
- [19] S. L. Chuang,
Physics of Photonic Devices,
2nd ed., Wiley (2009), Chapter 6, Section 6, pp. 104–107.
- [20] S. L. Chuang,
Physics of Photonic Devices,
2nd ed., Wiley (2009), Chapter 9, Section 1, pp. 347–349.
- [21] D. J. Griffiths,
Introduction to Electrodynamics,
3rd ed., Prentice Hall (1999), p. 595.
- [22] T. G. Mayerhöfer, S. Pahlow y J. Popp,
The Bouguer–Beer–Lambert Law: Shining Light on the Obscure,
ChemPhysChem **21** (2020) 2031,
<https://doi.org/10.1002/cphc.202000464>.
- [23] S. Schulz,
Electronic and optical properties of quantum dots: a tight-binding approach,
PhD Thesis, Universität Bremen, 2007.
- [24] A. Zunger,
Pseudopotential Theory of Semiconductor Quantum Dots,
physica status solidi (b) **224** (2001) 727–734,
<https://doi.org/fvcx2k>
- [25] M. Ghandchi, G. Darvish y M. Moravvej-Farshi,
Electronic Properties of Various Graphene Quantum Dot Structures: an Ab Initio Study,
Tabriz Journal of Electrical Engineering, 2020.
- [26] N. Vukmirovic y L. W. Wang,
Quantum Dots: Theory,
Comprehensive Nanoscience and Technology **1** (2011),
- [27] R. de L. Kronig y W. G. Penney,
Quantum mechanics of electrons in crystal lattices,
Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character **130** (1931) 499–513,
<https://doi.org/10.1098/rspa.1931.0019>.
- [28] K. Pavelich y F. Marsiglio,
The Kronig–Penney model extended to arbitrary potentials via numerical matrix mechanics,
American Journal of Physics **83** (2015) 773–781,
<https://doi.org/10.1119/1.4923026>.
- [29] K. Pavelich y F. Marsiglio,
Calculation of 2D electronic band structure using matrix mechanics,
American Journal of Physics **84** (2016) 924–935,
<https://doi.org/10.1119/1.4964353>.
- [30] S. L. Chuang,
Physics of Photonic Devices,
2nd ed., Wiley (2009), Chapter 9, Section 2, pp. 352–356.
- [31] K. Soetaert,
plot3D: Plotting Multi-Dimensional Data,
R Project (2024),
<https://cran.r-project.org/package=plot3D>.
- [32] ASTM,
Standard Solar Constant and Zero Air Mass Solar Spectral Irradiance Tables,
American Society for Testing and Materials (2006),
<https://doi.org/10.1520/E0490-22>.



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:	Electrónica fmgomez@ugr.es

Cotutor/a:

Departamento y Área de Conocimiento:

Correo electrónico:

Título del Trabajo: Estudio de la absorción de fotones en redes periódicas de puntos cuánticos mediante modelos simplificados

Tipología del Trabajo: <i>(Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14)</i>	<i>(Marcar con X)</i>	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:

Las redes periódicas de puntos cuánticos coloidales se proponen como una alternativa para la obtención de materiales con una estructura electrónica capaz de cumplir las condiciones de la teórica “célula solar de banda intermedia”[1][2]. En este trabajo se plantea la tarea de modelar una red periódica de puntos cuánticos mediante el uso de potenciales cuadrados de distintos tamaños y, a partir de ahí, obtener la banda intermedia y deducir propiedades físicas de materiales con esta estructura electrónica.

Objetivos planteados:

- Realizar el cálculo de la estructura electrónica de una red periódica bidimensional de pozos cuadrados.
- Estudiar la dependencia de la estructura de bandas con los parámetros de la red (tamaño de pozo, distancia entre pozos...)
- Realizar estimaciones de las propiedades ópticas del sistema mediante modelos sencillos.

Metodología:

Se realizará la implementación del cálculo de la estructura de la red periódica mediante el uso del modelo de Kronig-Penney. A partir de las soluciones de la ecuación y haciendo una propuesta adecuada de qué bandas se identificarán con las bandas de conducción, de valencia e intermedia, se realizará el cálculo del coeficiente de absorción de fotones. Se analizarán los resultados, prestando especial atención a la fuerza de oscilador (“oscillator strength”) de las distintas transiciones entre estados, intentando establecer reglas que permitan entender la física de estos sistemas a partir de estos modelos simplificados.

Bibliografía:

[1]Rebeca V. H. Hahn, Salvador Rodríguez-Bolívar, Panagiotis Rodosthenous, Erik S. Skibinsky-Gitlin, Marco Califano, Francisco M. Gómez-Campos “Optical Absorption in N-Dimensional Colloidal Quantum Dot Arrays: Influence of Stoichiometry and Applications in Intermediate Band Solar Cells”, Nanomaterials, 12, 3387 (2022)

[2] Erik S. Skibinsky-Gitlin, Salvador Rodríguez-Bolívar, Marco Califano, Francisco M. Gómez Campos, “Optical properties



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

of nanocrystal films: blue shifted transitions as signature of strong coupling”, Nanoscale Advances, 2, 384 (2019)

A llenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG
Alumno/a propuesto/a: Manuel Almagro Rivas

Granada, 23 de mayo 2023

Sello del Departamento