



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Exploración de algoritmos de cálculo para el estudio teórico de la emisión de luz por distribuciones de puntos cuánticos

Descripción general (resumen y metodología):

En este Trabajo Fin de Grado se desarrollará un simulador computacional sencillo para estudiar el transporte electrónico y la emisión de luz en puntos cuánticos semiconductores tipo core-shell. El trabajo se basará en la resolución de los estados electrónicos confinados en las bandas de conducción y valencia mediante modelos de pozo esférico finito.

A partir de estos estados se calcularán los canales de transmisión utilizando el formalismo del Hamiltoniano de Transferencia y se estimará la corriente eléctrica mediante el formalismo de Landauer bajo una diferencia de potencial aplicada. Asimismo, se implementará un modelo simplificado de recombinación electrón-hueco para analizar la emisión radiativa.

La programación se realizará principalmente en Python y se explorarán de forma introductoria posibles aplicaciones de computación cuántica a problemas de simulación en nanoestructuras semiconductoras.

Este trabajo se propone dentro de las actividades de la Cátedra Valeo-UGR.

Metodología

Se modelarán los puntos cuánticos mediante pozos esféricos finitos y se resolverá numéricamente la ecuación de Schrödinger para obtener autovalores y autofunciones en las bandas de conducción y valencia.

Posteriormente, se implementarán modelos de transporte electrónico usando el Hamiltoniano de Transferencia y el formalismo de Landauer para calcular corrientes bajo polarización externa. También se incluirá un modelo sencillo de recombinación electrón-hueco para estimar emisión radiativa.

La programación se realizará en Python utilizando bibliotecas científicas como NumPy, SciPy y Matplotlib. Además, se explorarán herramientas básicas de computación cuántica aplicadas a simulación cuántica.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

- Resolver numéricamente los estados electrónicos y de huecos en puntos cuánticos core-shell.
- Implementar modelos de transporte basados en el Hamiltoniano de Transferencia y el formalismo de Landauer.
- Estudiar procesos de recombinación radiativa en puntos cuánticos.
- Desarrollar un simulador básico en Python para el análisis de transporte y emisión de luz.
- Explorar posibles aplicaciones de computación cuántica en simulación de nanoestructuras.

Bibliografía básica:

- E. S. Skibinsky-Gitlin, S. Rodríguez-Bolívar, M. Califano, F. M. Gómez-Campos, "Optical properties of nanocrystal films: blue shifted transitions as signature of strong coupling", *Nanoscale Advances*, 2, 384-393 (2020)

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: FRANCISCO MANUEL GÓMEZ CAMPOS

Ámbito de conocimiento/Departamento: ELECTRÓNICA

Correo electrónico: fmgomez@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos:

Ámbito de conocimiento/Departamento:

Correo electrónico:

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos: Juan José Santaella Hernández

Correo electrónico: juan-jose.santaella@valeo.com

Nombre de la empresa o institución: Valeo

Dirección postal: C. Linares, 15, 23600 Martos, Jaén

Puesto del tutor en la empresa o institución: Electronics Architect

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos:

Correo electrónico: