

Estudio de las propiedades de transporte en materiales nanoestructurados mediante simulación por marcha aleatoria

Juan Antonio Anta*; Juan Bisquert; Ivan Mora-Seró; Víctor Morales-Flórez

Departamento de Sistemas Físicos, Químicos y Naturales

Universidad Pablo de Olavide

Carretera de Utrera km1. 41013 Sevilla; Departament de Física, Universitat Jaume I, 12071 Castelló

Departamento de Física de la Materia Condensada, Universidad de Cádiz

En esta presentación mostramos el trabajo realizado en simulación por marcha aleatoria para calcular coeficientes de difusión electrónica y otros parámetros de transporte en materiales nanoestructurados de aplicación a la fabricación de dispositivos optoelectrónicos y células solares de nueva generación. Las simulaciones se realizan en redes tridimensionales de *trampas* con energías distribuidas conforme a una distribución exponencial o a una función pasa centrada en el nivel de Fermi. Se observa por ejemplo que una vez se alcanza el estado estacionario la ocupación de las trampas sigue una distribución de Fermi-Dirac con un nivel de Fermi bien definido. También se analiza cómo el sistema se acerca al estado estacionario y cómo se pasa de un régimen de transporte anómalo a otro de transporte limitado por efectos de *trapping*. Los resultados de simulación reproducen pre-

dicciones analíticas de los modelos de *multiple trapping* y de *hopping*. También se presentan resultados de simulación que sirven para modelizar experimentos de fotovoltajes transitorios en películas de materiales mesoporosos y nanocristalinos. Finalmente se presentan cálculos ejecutados sobre redes desordenadas de trampas construidas sobre empaquetamientos aleatorios de esferas que reproducen la morfología básica de películas de materiales mesoporosos y nanocristalinos.^{1,2}

* anta@upo.es

¹ Anta, J. A.; Nelson, J.; Quirke, N.; *Phys. Rev. B* **2002**, 65 125324.

² Anta, J. A.; Mora-Seró, I.; Dittrich, T; Bisquert J.; *J. Phys. Chem. C* **2007**, 111 13997.