

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA



INSTITUTO DE FÍSICA
"Luis Rivera Terrazas"



SEMINARIO SEMANAL
"DR. JESUS REYES CORONA"

"Desarrollo de métodos ab initio para el estudio de excitaciones electrónicas en moléculas y sólidos extendidos"

Dr. Miguel Ángel Pérez Osorio
Oxford University, UK.

El desarrollo de tecnologías eficientes para la generación de energía eléctrica es un reto que ha estado enfrentando la humanidad en las últimas décadas. Una de las tecnologías que ha cobrado gran importancia son las celdas solares sensibilizadas con materiales colorantes. Para lograr celdas solares de este tipo que sean altamente eficientes, es necesario comprender la física de los procesos electrónicos y dinámicos que tienen lugar durante su funcionamiento. En el caso particular de los procesos electrónicos, el estudio de las propiedades electrónicas, tales como el ancho de banda prohibida, el alineamiento de bandas, y los procesos de transferencia de carga que tienen lugar, es fundamental. Estas propiedades están relacionadas con las excitaciones electrónicas de los materiales. El uso de métodos teóricos puede contribuir a una mejor comprensión de los resultados experimentales sobre las propiedades electrónicas de los materiales que componen la celda solar, y a predecir e identificar materiales potenciales para la fabricación de celdas solares altamente eficientes. En este seminario se presentarán los resultados de la implementación de dos métodos ab initio para el estudio de excitaciones electrónica en moléculas y sólidos extendidos. Los métodos son la aproximación GW y la teoría funcional de la densidad con ligaduras. Estos métodos fueron implementados dentro del código SIESTA, que está basado en el uso de orbitales estrictamente localizados, lo que abre la posibilidad de estudiar sistemas con miles de átomos. Además, se presentarán algunos resultados teóricos y experimentales de las propiedades electrónicas, estructurales y termodinámicas del TiO_2 . Este material ha sido ampliamente usado en la fabricación de celdas solares sensibilizadas con colorantes

Auditorio-IFUAP
Viernes 10 de Enero de 2014
13:00 Hrs.