



## Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

**Tutor/a:** Blanca Biel Ruiz

**Departamento y Área de Conocimiento:** Física Atómica, Molecular y Nuclear

**Cotutor/a:**

**Departamento y Área de Conocimiento:**

**Título del Trabajo:** Propiedades de nanomateriales a escala atómica

**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	X	5. Elaboración de un proyecto	
3. Trabajos experimentales		6. Trabajo relacionado con prácticas externas	

**Breve descripción del trabajo:**

Estudio computacional de las propiedades estructurales y electrónicas de materiales bidimensionales [1] (grafeno, dicalcogenuros de metales de transición, etc.) y sus defectos potenciales mediante métodos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). La Teoría del Funcional de la Densidad es una técnica actual avanzada para el cálculo de estructuras electrónicas, basada en la aplicación de la mecánica cuántica a sistemas de muchas partículas, que combina la precisión en los cálculos con su facilidad de aplicación para el estudio de sistemas complejos [2].

En los materiales bidimensionales, de espesor atómico (1-3 Angstrom), los defectos más comunes (vacantes de átomos, dopantes, sustitución de átomos de una especie química por otra) tienen un gran impacto en sus propiedades electrónicas, y es necesario utilizar para su estudio métodos de simulación cuánticos que tengan en cuenta detalles a escala atómica. El análisis de dichos defectos y de las distintas combinaciones de materiales bidimensionales se utiliza de forma habitual en el ámbito de la nanotecnología para diseñar nuevos materiales con propiedades específicas.

**Objetivos planteados:**

- Familiarizarse con el trabajo en un entorno UNIX/LINUX: editores de texto, herramientas gráficas de visualización de datos, herramientas para la manipulación de estructuras atómicas, etc.
- Aprender a manejar de forma básica métodos de simulación de estructura electrónica basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).
- Estudiar el efecto en las propiedades estructurales (longitud y ángulos de enlaces entre átomos) y electrónicas (estructura de bandas, densidad de estados) de la inclusión de defectos (vacantes de átomos), dopantes, o combinación de distintos materiales bidimensionales.

**Metodología:**

- Selección de materiales y defectos a estudiar. Estudio de sus propiedades a partir de bibliografía básica facilitada por la tutora.
- Simulación de ejemplos/tutoriales mediante el código de simulación SIESTA. [3]
- Simulación de material y defecto(s) elegidos mediante el código de simulación SIESTA.



- Análisis de las propiedades estructurales y electrónicas del material y defecto(s) seleccionados. Comparación con el caso ideal. Comparación con otros materiales (si el tiempo lo permite.)

#### Conocimientos requeridos:

- Conocimiento del entorno LINUX/UNIX (nivel usuario)
- Conocimientos de Estado Sólido y Física Cuántica
- Conocimientos de un lenguaje de programación (python, fortran, C++, etc.) a nivel básico pueden ser útiles.

#### Bibliografía:

##### Introducción:

- [1] <https://www.scientificamerican.com/espanol/noticias/materiales-bidimensionales-crean-nuevas-herramientas-para-los-tecnologos/>  
[2] [https://es.wikipedia.org/wiki/Teor%C3%ADa\\_del\\_funcional\\_de\\_la\\_densidad](https://es.wikipedia.org/wiki/Teor%C3%ADa_del_funcional_de_la_densidad)  
[3] <https://es.wikipedia.org/wiki/SIESTA>

##### Para profundizar:

- [1] <http://science.sciencemag.org/content/353/6298/aac9439/tab-figures-data>  
<https://www.nature.com/articles/natrevmats201642>  
<https://www.nature.com/articles/natrevmats201733>
- [2] [https://www.nobelprize.org/nobel\\_prizes/chemistry/laureates/1998/index.html](https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/chemistry/laureates/1998/index.html)  
*Electronic Structure Basic Theory and Practical Methods*  
Richard M. Martin  
Cambridge University Press (2004).
- [3] *The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation*  
J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal  
J. Phys.: Condens. Matter **14**, 2745-2779 (2002)

*Density-functional method for very large systems with LCAO basis sets*  
D. Sánchez-Portal, P. Ordejón, E. Artacho and J. M. Soler  
Int. J. Quantum Chem., **65**, 453 (1997).



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA



Facultad de Ciencias  
Sección de Físicas

*A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG*  
*Alumno/a propuesto/a:*

Granada, 28 de junio 2020