



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: Blanca Biel Ruiz

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

Correo electrónico: biel@ugr.es

Cotutor/a:

Departamento y Área de Conocimiento:

Correo electrónico:

Título del Trabajo: Nanomagnetismo en materiales bidimensionales: comparación de dopantes magnéticos en semiconductores 2D.

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 electrónicas y magnéticas de materiales bidimensionales [1] (grafeno, dicalcogenuros de metales de transición, etc.) 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.

En este Trabajo de Fin de Grado se estudiará el efecto de incluir dopantes magnéticos en materiales bidimensionales semiconductores. Se caracterizará el material ideal (sin dopantes) y se estudiarán sus propiedades al incluir átomos magnéticos de diferentes especies.

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, incluyendo dopantes magnéticos.



Metodología:

- Selección de materiales y dopantes a estudiar. Estudio de sus propiedades a partir de bibliografía básica facilitada por la tutora.
- Simulación de ejemplos/tutoriales mediante el código de simulación elegido.
- Simulación de material y dopante(s) elegidos mediante el código de simulación elegido.
- Análisis de las propiedades estructurales y electrónicas del material y dopante(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
[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
Electronic Structure Basic Theory and Practical Methods
Richard M. Martin
Cambridge University Press (2004).

A rellenar sólo en el caso que el alumno sea quien realice la propuesta de TFG

Alumno/a propuesto/a: Pedro Julián Delgado Galindo

Granada, 18 de mayo de 2021

Sello del Departamento



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

*Campus Fuentenueva
Avda. Fuentenueva s/n
18071 Granada
Tfno. +34-958242902
fisicas@ugr.es*

Comisión Docente de Físicas
Facultad de Ciencias