



Propuesta de Trabajo Fin de Grado del Doble Grado en Física y Matemáticas (curso 2021-2022)

Responsable de tutorización: Blanca Biel Ruiz

Correo electrónico: biel@ugr.es

Departamento: Física Atómica, Molecular y Nuclear

Área de conocimiento: Física Atómica, Molecular y Nuclear

Responsable de cotutorización:

Correo electrónico:

Departamento:

Área de conocimiento:

(Rellenar sólo en caso de que la propuesta esté realizada a través de un estudiante)

Estudiante que propone el trabajo:

Título: Simulaciones a escala atómica de materiales bidimensionales para spintrónica y otras aplicaciones

Número de créditos: 6 ECTS 12 ECTS

Tipología del trabajo (marcar una o varias de las siguientes casillas):

- 1. Revisiones y/o trabajos bibliográficos sobre el estado actual de aspectos específicos relacionados con la titulación
- 2. Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática de la titulación, a partir del material disponible en los centros
- 3. Trabajos experimentales, de toma de datos de campo, de laboratorio, etc.
- 4. Elaboración de nuevas prácticas de laboratorio
- 5. Elaboración de un informe o un proyecto en el ámbito del grado de naturaleza profesional
- 6. Trabajos relacionados con las prácticas externas

Descripción y resumen de contenidos:

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 estudiarán materiales bidimensionales de distinta naturaleza. Se caracterizará el material ideal (sin desorden) y se estudiarán sus propiedades bajo la influencia de factores externos (dopantes, campo eléctrico externo, sustrato, etc.) En función de los intereses del alumno se seleccionarán los materiales más adecuados para distintas aplicaciones: spintrónica, simulaciones de microscopía cuántica (STM y AFM), etc.

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.

Actividades a desarrollar:

- 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 elegido
- Simulación de material y defecto(s) elegidos mediante el código de simulación elegido
- 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.)

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.

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).

Firma del estudiante
(solo para trabajos propuestos por alumnos)

Firma del responsable de tutorización

Firma del responsable de cotutorización *(en su caso)*

En Granada, a 18 de mayo de 2021