



Universidad de Granada



Facultad de
Ciencias
Sección de
Físicas

Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: Blanca Biel Ruiz

Departamento y Área de Conocimiento: Electrónica y Tecnología de Computadores – Electrónica

Cotutor/a: Francisco J. García Ruiz

Departamento y Área de Conocimiento: Electrónica y Tecnología de Computadores – Electrónica

Título del Trabajo: Estudio del impacto del strain y defectos atómicos en láminas de MoS₂ mediante métodos atomísticos (DFT y *tight-binding*)

Tipología del Trabajo: Trabajo bibliográfico

Breve descripción del trabajo:

El alumno aprenderá las bases físicas y el manejo básico de herramientas de simulación para el cálculo de estructura de bandas basadas en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) y el método *tight-binding*. Estas herramientas son imprescindibles para una descripción correcta de la estructura electrónica de materiales bidimensionales como el grafeno y el MoS₂, que precisan un tratamiento cuántico que incluya detalles a escala atómica.

Posteriormente, realizará un estudio bibliográfico sobre el impacto del *strain* y los defectos en láminas de MoS₂.

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

Alumno/a propuesto/a: Jorge Rodríguez Ruiz

Granada, 9 de junio de 2014

Campus
Fuentenueva
Avda. Fuentenueva
s/n
18071 Granada
Tfno. +34-615951701
fisicas@ugr.es

Comisión Docente de Físicas
Facultad de Ciencias



Aprobado 13/6/2014