



## Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

<b>Tutor/a:</b>	Blanca Biel Ruiz
<b>Departamento y Área de Conocimiento:</b>	Electrónica y Tecnología de Computadores/Electrónica
<b>Cotutor/a:</b>	
<b>Departamento y Área de Conocimiento:</b>	
<b>Título del Trabajo:</b>	Simulación a escala atómica de materiales bidimensionales para nanodispositivos
<b>Tipología del Trabajo:</b> <i>(Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/15)</i>	<i>Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del grado, a partir de material ya disponible en los Centros</i>

### Breve descripción del trabajo:

Estudio computacional de las propiedades estructurales y electrónicas de materiales bidimensionales (grafeno, dicalcogenuros de metales de transición, etc.) mediante métodos de primeros principios (*ab initio*) basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).

Se estudiará el efecto en las propiedades estructurales (longitud y ángulos de enlace atómico) y electrónicas (estructura de bandas, densidad de estados) de la inclusión de defectos (vacantes de átomos), dopantes, o combinación de distintos materiales bidimensionales. En estos materiales, de espesor atómico (1-3 Angstroms), este tipo de defectos tiene un gran impacto, pudiendo utilizarse para diseñar nuevos materiales con las propiedades deseadas.

### Conocimientos requeridos:

- Al menos un lenguaje de programación (python, fortran, C++, etc.) (nivel básico)
- Conocimiento del entorno Linux (nivel usuario)
- Conocimientos de estado sólido y mecánica cuántica

### Objetivos planteados:

- Aprender a utilizar correctamente de forma autónoma programas de simulación basados en la Teoría del Funcional de la Densidad para sistemas sencillos.
- Aprender el uso de programas para la extracción de datos relevantes (estructura atómica, estructura de bandas, densidad de estados, carga electrónica, etc.)
- Aprender a interpretar los resultados.
- Familiarizarse con la bibliografía más relevante sobre la metodología y el sistema de estudio.



**Metodología:**

- Programas de simulación basados en la Teoría del Funcional de la Densidad: SIESTA, VASP .
- Programas de extracción de datos: gnubands, jmol, xmakemol, pymol, vmd, vesta, xmgrace .

**Bibliografía:**

Materiales bidimensionales:

Nobel Lecture: Graphene: Materials in the Flatland, K. S. Novoselov, Rev. Mod. Phys. 83, 837

Van der Waals heterostructures, A. K. Geim & I. V. Grigorieva

Nature 499, 419–425 (2013)

SIESTA:

The SIESTA method for ab-initio order-N materials simulation

J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, and D. Sánchez-Portal,

J. Phys.: Condens. Matt. 14, 2745-2779 (2002).

VASP:

G. Kresse and J. Hafner. Ab initio molecular dynamics for liquid metals. Phys. Rev. B, 47:558, 1993.

G. Kresse and J. Hafner. Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metal-amorphous-semiconductor transition in germanium. Phys. Rev. B, 49:14251, 1994.

G. Kresse and J. Furthmüller. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. Comput. Mat. Sci., 6:15, 1996.

G. Kresse and J. Furthmüller. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. Phys. Rev. B, 54:11169, 1996.



Universidad de Granada



Facultad de  
Ciencias  
Sección de  
Físicas

Empty rectangular box for student information.

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

Granada, de 2016