



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:** Física Atómica, Molecular y Nuclear

**Cotutor/a:**  
**Departamento y Área de Conocimiento:**

**Título del Trabajo:** Caracterización de sistemas bidimensionales a escala atómica

<b>Tipología del Trabajo:</b> (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 (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 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. 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 Física Atómica, Física del Estado Sólido y Física Cuántica

### Objetivos planteados:

- Aplicar nociones básicas de Física Atómica, Física del Estado Sólido y Física Cuántica al estudio de Ciencia de Materiales
- Aprender nociones básicas de la Teoría del Funcional de la Densidad [Hohenberg1964, Kohn1965]
- Aprender a manejar de forma básica uno o más códigos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) [Kresse1996, SIESTA2002]
- Aprender a manejar las herramientas de procesamiento de datos obtenidos mediante uno o más códigos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)
- Familiarizarse con las características a nivel atómico de los materiales bidimensionales [Novoselov2004, Geim2013]
- Caracterizar mediante métodos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad uno o varios sistemas bidimensionales en presencia de desorden (defectos, sustratos, combinaciones con otros materiales.)

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

**Comisión Docente de Físicas**  
Facultad de Ciencias



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA



Facultad de  
Ciencias  
Sección de  
Físicas

**Metodología:**

- Revisión de la bibliografía.
- Aprendizaje del uso básico de uno o más códigos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT).
- Caracterización de uno o varios sistemas bidimensionales mediante códigos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) y sus herramientas de procesamiento de datos.

**Bibliografía:**

- [Hohenberg1964] P. Hohenberg and W. Kohn, Phys. Rev. 136, B864 (1964)  
[Kohn1965] W. Kohn and L. J. Sham, Phys. Rev. 140, A1133 (1965)  
[Kresse1996] Kresse & Furthmuller, Comput. Mat. Sci. 6, 15 (1996)  
[SIESTA2002] J. M. Soler et al., Journal of Physics-Condensed Matter 14, 2745 (2002)  
[Novoselov2004] K.S. Novoselov et al., Science 306, 666 (2004)  
[Geim2013] A. K. Geim and I. V. Grigorieva, Nature 499, 419 (2013)

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

Granada, 17 de mayo 2017

Sello del Departamento

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

**Comisión Docente de Físicas**  
Facultad de Ciencias