

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: Propiedades electrónicas de sistemas bidimensionales a escala atómica

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 estructurales y electrónicas de materiales bidimensionales [1] (grafeno, dicalcogenuros de metales de transición, etc.) y sus defectos potenciales mediante métodos de primeros principios (*ab initio*) basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) [2].

En estos materiales, 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

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.

Metodología:

- 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 SIESTA. [3]
- Simulación de material y defecto elegidos mediante el código de simulación SIESTA.



- *Análisis de las propiedades estructurales y electrónicas del material y defecto seleccionados. Comparación con el caso ideal. Comparación con otros materiales (si el tiempo lo permite.)*

Conocimientos requeridos:

- *Al menos un lenguaje de programación (python, fortran, C++, etc.) (nivel básico)*
- *Conocimiento del entorno LINUX/UNIX (nivel usuario)*
- *Conocimientos de Estado Sólido y Física Cuántica*

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).
- [3] *The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation*
J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. Sánchez-Portal
J. Phys.: Condens. Matter **14**, 2745-2779 (2002)
- Density-functional method for very large systems with LCAO basis sets*
D. Sánchez-Portal, P. Ordejón, E. Artacho and J. M. Soler
Int. J. Quantum Chem., **65**, 453 (1997).

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

Granada, 8 de mayo de 2018

Sello del Departamento