



## Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

|   |  |
|---|--|
| <b>Tutor/a:</b>                             | Mohit Ganeriwala                                       |
| <b>Departamento y Área de Conocimiento:</b> | Electrónica y Tecnología de Computadores, Electrónica. |
| <b>Correo electrónico:</b>                  | mohit@ugr.es   |
| <b>Cotutor/a:</b>                           | Enrique González Marín                                 |
| <b>Departamento y Área de Conocimiento:</b> | Electrónica y Tecnología de Computadores, Electrónica  |
| <b>Correo electrónico:</b>                  | egmarin@go.ugr.es                                      |

**Título del Trabajo:** Estudio del transporte iónico en baterías utilizando Quantum ATK

|  |                |                                       |   |   |  |
|--|----------------|---------------------------------------|---|---|--|
| <b>Tipología del Trabajo:</b><br>(Segun punto 3 de las Directrices del TFG aprobadas por Comisión Docente el 10/12/14) | (Marcar con X) | 1. Revisión bibliográfica             | X | 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:

Las baterías son uno de los componentes más importantes en casi todas las aplicaciones electrónicas, incluidos los dispositivos móviles, los dispositivos informáticos, los automóviles eléctricos, etc. La selección sistemática de materiales y la optimización del rendimiento a través del codiseño de la estructura y la química, acortando el tiempo de desarrollo de la batería a un costo reducido tiene una enorme aplicación industrial. Este trabajo implica la investigación de materiales y su aplicación en baterías utilizando métodos de primeros principios y comprendiendo la operación desde los conceptos básicos.

### Objetivos planteados:

Los objetivos planteados para este trabajo son los siguientes:

- Familiarizarse con la herramienta de simulación Quantum ATK.
- Comprender la estructura y los materiales utilizados en baterías.
- Comprender el almacenamiento de carga dentro de los materiales.
- Estudiar el transporte de carga dentro del material.

### Metodología:

El trabajo comenzará con una revisión bibliográfica del tema planteado. A continuación, el estudiante se familiarizará con las herramientas numéricas de cálculo: uso de Quantum-ATK para simular la estructura prístina del material. Posteriormente estudiará el transporte iónico utilizando descripciones basadas en dinámica molecular en varias estructuras y concentraciones. Calculará varias propiedades de transporte de iones/carga, barreras de energía de difusión, etc

### Bibliografía:

<https://www.synopsys.com/silicon/quantumatk/materials-modeling/battery-simulation.html>

Para más información consultar con los tutores: [mohit@ugr.es](mailto:mohit@ugr.es),



UNIVERSIDAD  
DE GRANADA



Facultad de Ciencias  
Sección de Físicas

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

Granada, 20 de mayo de 2022

Sello del Departamento