



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a:	Mohit Ganeriwala
Departamento y Área de Conocimiento:	Electrónica y Tecnología de Computadores
Correo electrónico:	mohit@ugr.es
Cotutor/a:	Francisco Pasadas Cantos
Departamento y Área de Conocimiento:	Electrónica y Tecnología de Computadores
Correo electrónico:	fpasadas@ugr.es

Título del Trabajo:	Simulación del transporte electrónico en materiales 2D monocapa mediante métodos de primeros principios				
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	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:

Uno de los dispositivos más relevantes para el desarrollo de la futura computación neuromórfica es el denominado memristor, cuyo funcionamiento emula el comportamiento de las sinapsis existentes en la estructura neuronal del cerebro humano. Los memristores son esencialmente un sándwich de material semiconductor o aislante entre dos electrodos metálicos, que funciona bajo la combinación del transporte iónico y el electrónico.

El uso de materiales 2D para aplicaciones memristivas proporciona capacidades adicionales al dispositivo. Por tanto, la comprensión del transporte iónico y electrónico en este tipo de materiales es crucial para la obtención de memristores óptimos para aplicaciones neuromórficas.

El trabajo implica el empleo de técnicas de primeros principios, y en particular de DFT, para la simulación y comprensión del transporte electrónico en materiales 2D monocapa, cuyo funcionamiento será posteriormente empleado para la realización del meristor.

Objetivos planteados:

- Familiarización con la teoría del DFT.
- Familiarización con la herramienta Quantum-ATK.
- Exploración de las funcionalidades de Quantum-ATK para la simulación del transporte electrónico.
- Comprensión de los mecanismos de transporte en materiales 2D.
- Cálculo de las características I-V en dispositivos de materiales 2D.

Metodología:

- Revisión bibliográfica
- Empleo de Quantum-ATK para la simulación de la estructura pura del material.
- Cálculo de las propiedades electrónicas de transporte.
- Estudio de diversas estructuras y materiales 2D.
- Estudio de los mecanismos de transporte influyentes en el comportamiento de los dispositivos memristivos, y análisis de las capacidades de Quantum-ATK para la simulación de dichos mecanismos.

Bibliografía:

- [1] Wong, H-S. Philip, et al. "Metal-oxide RRAM." Proceedings of the IEEE 100.6 (2012): 1951-1970.
[2] Cao, Guiming, et al. "2D material based synaptic devices for neuromorphic computing." Advanced Functional Materials 31.4 (2021): 2005443.

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

Alumno/a propuesto/a:



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

Granada, 20 de mayo de 2022

Sello del Departamento