



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

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

Título del Trabajo: Estudio de la estructura de vacantes y su transporte en materiales 2D

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:

Los memristores son dispositivos electrónicos que permiten emular el comportamiento sináptico de la estructura neurológica del cerebro humano. Un memristor puede fabricarse esencialmente como un sándwich de aislante o semiconductor entre dos electrodos metálicos. Desde el descubrimiento del memristor, se han estudiado varios materiales y estructuras para aplicaciones memristivas y se ha encontrado que el mecanismo memristivo es altamente dependiente del sistema material/dispositivo. Todavía hay ambigüedades y falta de comprensión de la física subyacente que da lugar a los fenómenos memristivos. La comprensión del mecanismo memristivo es esencial para optimizar el funcionamiento de estos dispositivos. En este trabajo se estudiará un mecanismo particular observado en materiales bidimensionales (2D), consistente en el transporte de vacantes. El estudio de este tipo de transporte puede ser especialmente relevante para el entender el funcionamiento de memristores basados materiales 2D y su aplicación en dispositivos memristivos.

Objetivos planteados:

Los objetivos planteados para este trabajo son los siguientes:

- Familiarizarse con la teoría del funcional de la densidad (DFT)
- Familiarizarse con el uso de la herramienta Quantum-ATK
- Entender la estructura de vacantes en materiales 2D
- Calcular la barrera de energía para la difusión de vacantes dentro del material.
- Estudiar el transporte electrónico dentro del material en presencia de vacantes

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 la introducción controlada de vacantes dentro del material con distinta estructura y concentración. Se calcularán varias propiedades de transporte de vacantes, barreras de difusión etc. Se compararán diversos materiales 2D buscando optimizar el diseño del dispositivo memristivo.



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

Bibliografía:

- Wong, H-S. Philip, et al. "Metal-oxide RRAM." *Proceedings of the IEEE* 100.6 (2012): 1951-1970.
- Cao, Guiming, et al. "2D material based synaptic devices for neuromorphic computing." *Advanced Functional Materials* 31.4 (2021): 2005443.
- Le, Duy, Takat B. Rawal, and Talat S. Rahman. "Single-layer MoS2 with sulfur vacancies: structure and catalytic application." *The Journal of Physical Chemistry C* 118.10 (2014): 5346-5351.

Para más información consultar con los tutores: mohit@ugr.es,

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