



Propuesta de Trabajo Fin de Grado en Física

Tutor/a: Blanca Biel Ruiz

Departamento y Área de Conocimiento: Física Atómica, Molecular y Nuclear

Correo electrónico: biel@ugr.es

Cotutor/a: Pablo Canca López

Departamento y Área de Conocimiento: Física Atómica, Molecular y Nuclear

Correo electrónico: pcanca@ugr.es

Título del Trabajo: Uso de técnicas *ab-initio* para el análisis del MoS₂ y aplicaciones en tecnología de células solares

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 electrónicas y magnéticas de materiales bidimensionales [1] (grafeno, dicalcogenuros de metales de transición, etc.) mediante métodos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). La Teoría del Funcional de la Densidad es una técnica actual avanzada para el cálculo de estructuras electrónicas, basada en la aplicación de la mecánica cuántica a sistemas de muchas partículas, que combina la precisión en los cálculos con su facilidad de aplicación para el estudio de sistemas complejos [2].

En los materiales bidimensionales, de espesor atómico (1-3 Angstrom), tanto el sustrato como los defectos más comunes (vacantes de átomos, 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 y sustratos se utiliza de forma habitual en el ámbito de la nanotecnología para diseñar nuevos materiales con propiedades específicas.

En particular, el MoS₂ está adquiriendo especial relevancia por sus aplicaciones en tecnologías de células solares en combinación con perovskitas orgánicas/inorgánicas, mejorando las propiedades optoelectrónicas de estas últimas.

En este Trabajo de Fin de Grado se estudiará el MoS₂ y sus propiedades y la dependencia de estas con el espesor y con los defectos más comunes. En función del tiempo y de la motivación del alumno/a, se estudiarán las propiedades de la heterounión MoS₂ / CsPbI₃ y sus aplicaciones en tecnología de células solares.

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).
- Obtener las propiedades fundamentales del MoS₂ y estudiar la influencia del espesor y defectos en ellas.
- Opcional: Estudiar la intercara PbCsI₃ / MoS₂, la dependencia con la terminación atómica y la energía de *binding*.

Metodología:

- Selección de materiales. Estudio de sus propiedades a partir de bibliografía básica facilitada por la tutora.
- Simulación de ejemplos/tutoriales mediante el código de simulación elegido.
- Simulación de los materiales elegidos mediante el código de simulación elegido.
- Obtención de propiedades fundamentales del MoS₂ e influencia del espesor y defectos.
- Opcional: Modelización de la heterounión.
- Análisis de las propiedades estructurales y electrónicas de los materiales seleccionados. Comparación con otras heterouniones (si el tiempo lo permite).

Conocimientos requeridos:

- Conocimiento del entorno LINUX/UNIX (nivel usuario).
- Conocimientos de Estado Sólido y Física Cuántica.
- Conocimientos de un lenguaje de programación (Python, Fortran, C++, etc.) a nivel básico pueden ser útiles.

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://en.wikipedia.org/wiki/Vienna_Ab_initio_Simulation_Package

Tsai, Meng-Lin, et al. "Monolayer MoS₂ heterojunction solar cells." *ACS nano* 8.8 (2014): 8317-8322.

Para profundizar:

He, J., Su, J., Lin, Z., Zhang, S., Qin, Y., Zhang, J., ... & Hao, Y. (2019). Theoretical studies of electronic and optical behaviors of all-inorganic CsPbI₃ and two-dimensional MS₂ (M= Mo, W) heterostructures. *The Journal of Physical Chemistry C*, 123(12), 7158-7165.



UNIVERSIDAD
DE GRANADA



Facultad de Ciencias
Sección de Físicas

Singh, E., Kim, K. S., Yeom, G. Y., & Nalwa, H. S. (2017). Atomically thin-layered molybdenum disulfide (MoS₂) for bulk-heterojunction solar cells. *ACS applied materials & interfaces*, 9(4), 3223-3245.

Kohnehpoushi, S., Nazari, P., Nejand, B. A., & Eskandari, M. (2018). MoS₂: a two-dimensional hole-transporting material for high-efficiency, low-cost perovskite solar cells. *Nanotechnology*, 29(20), 205201.

<http://science.sciencemag.org/content/353/6298/aac9439/tab-figures-data>

<https://www.nature.com/articles/natrevmats201642>

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).

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

Alumno/a propuesto/a:

Granada, de 2023

Sello del Departamento