UNIVERSIDAD DE GRANADA

FACULTAD DE CIENCIAS

Propuesta TFG. Curso 2026/2027

GRADO: Grado en Física

CÓDIGO DEL TFG: 267-037-2026/2027

1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Estudio ab initio de las propiedades electrónicas de los dicalcogenuros de metal de transición 2-dimensionales tipo Janus y sus heterostructuras

Descripción general (resumen y metodología):

Desde la primera exfoliación y caracterización exitosa del grafeno en 2004, los materiales 2D, caracterizados morfológicamente por su estructura a capas con espesor atómico, han acaparado la atención de la comunidad científica en múltiples frentes. Ejemplos sobresalientes son los dicalcogenuros de metales de transición (TMDs), como el MoS_2 o el WSe_2. Más concretamente, y en un ámbito más reciente, los TMDs pueden ser funcionalizados de manera asimétrica de modo que sus caras superior e inferior poseen especies atómicas distintas. Este tipo de materiles, denominados Janus, han sido propuestos como candidatos prometedores para desempeñar una variedad de roles altamente especializados. Sin embargo, este concepto incipiente aún no ha sido explorado desde un marco teórico fundamental de orientado al diseño de dipositivos electrónicos. Por ello, se propone utilizar la herramienta de simulación atomística Quantum Atomistic Toolkit (ATK) para conducir cálculos de primeros principios relacionados con estas estructuras.

Tipología: Estudio de casos, teóricos o prácticos, relacionados con la temática del Grado.

Objetivos planteados:

La propuesta persigue la construcción de estructuras cristalinas tipo Janus 2D termodinámicamente estables, seguida de cálculos en el marco de la Teoría del Funcional de la Densidad para predecir la estructura de bandas de Janus TMDs y las heteroestructuras laterales formadas por un Janus TMD y un TMD intrínseco

Bibliografía básica:

10.1016/j.surfin.2023.103409
10.1016/j.ceramint.2025.06.183

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

Haber cursado las asignaturas de Electrónica Física y Física del Estado Sólido del grado de Física y opcionalmente la asignatura optativa de Nanoelectrónica del grado.

Plazas: 1

2. DATOS DEL TUTOR/A:

Nombre y apellidos: ENRIQUE GONZÁLEZ MARÍN

Ámbito de conocimiento/Departamento: ELECTRÓNICA

Correo electrónico: egmarin@ugr.es

3. COTUTOR/A DE LA UGR (en su caso):

Nombre y apellidos: ANDRÉS GODOY MEDINA

Ámbito de conocimiento/Departamento: ELECTRÓNICA

Correo electrónico: agodoy@ugr.es

4. COTUTOR/A EXTERNO/A (en su caso):

Nombre y apellidos:

Correo electrónico:

Nombre de la empresa o institución:

Dirección postal:

Puesto del tutor en la empresa o institución:

Centro de convenio Externo:

5. DATOS DEL ESTUDIANTE:

Nombre y apellidos: TERESA PUYOL LÓPEZ

Correo electrónico: teresapuyol@correo.ugr.es