



1. DATOS BÁSICOS DEL TFG:

Título: Modelado y simulación de diodos basados en heteroestructuras de dicalcogenuros de metales de transición 2D y sus variedades Janus

Descripción general (resumen y metodología):

Actualmente estamos siendo testigos de una revolución en ciencia de materiales liderada por los llamados materiales bidimensionales o 2D. Estos se caracterizan por una estructura a capas de espesor atómico, que interaccionan entre sí mediante fuerzas de van der Waals. Como resultado, es posible exfoliarlos y sintetizar muestras tan delgadas como una monocapa de espesor subnanométrico.

La versatilidad de los materiales 2D y en particular de los dicalcogenuros de metales de transición TMDs ha cruzado un nuevo umbral recientemente gracias a sus variedades Janus. Un material Janus a capas es aquel que posee caras superior e inferior con especies atómicas distintas, adquiriendo propiedades exóticas como resultado de la rotura de simetría cristalina del material intrínseco. Un ejemplo es el Janus obtenido por la selenización de una de las caras de la monocapa de MoS_2 (que consiste en un plano de átomos de Mo entre dos planos de átomos de S), obteniéndose S-Mo-Se. Dado que la estructura de bandas sufre notables modificaciones con respecto al material intrínseco de referencia, los Janus amplían sobremanera el abanico de posibilidades en cuanto a propiedades electrónicas. En particular, esto posibilita la síntesis viable de heteroestructuras customizadas de materiales 2D, de potencial interés práctico para construir heterouniones ultrafinas.

Sin embargo, los trabajos científicos de carácter teórico escasean, con tan solo algunos estudios atomísticos de las propiedades microscópicas de los materiales. En un dispositivo de prueba de concepto implementando una heteroestructura Janus/TMD, la escala de transporte es mesoscópica y requiere adoptar un modelo de transporte semi-clásico. En este nivel de abstracción, las propiedades electrónicas de los semiconductores, que pueden ser calculadas por métodos de primeros principios, se integran en la descripción a través de su estructura de bandas de equilibrio. Es por ello que se propone un estudio exploratorio de simulación semi-clásica de dispositivos basados en heteroestructuras Janus/TMD, para proyectar sus potenciales aplicaciones en electrónica emergente.

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

Objetivos planteados:

Basándose en las propiedades microscópicas predichas por cálculos ab initio sobre los Janus TMDs, se propone simular el funcionamiento de dispositivos electrónicos basados en heteroestructuras Janus TMD/TMD

Bibliografía básica:

10.1016/j.surfin.2023.103409,
10.1016/j.ceramint.2025.06.183,
10.1109/JEDS.2025.3542168.

Recomendaciones y orientaciones para el estudiante:

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

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: Iván Pérez Castro

Correo electrónico: iperezc2005@correo.ugr.es