



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Óxidos semiconductores para aplicaciones en fotocatalisis		
TITLE:	Semiconductor oxides for photocatalysis		
SUPERVISOR/ES:	Paloma Fernández Sánchez		
E-MAIL SUPERVISOR/ES:	arana@fis.ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☐	Bibliográfico X	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa X	Selección por expediente ☐	

OBJETIVOS:

Los óxidos semiconductores están recibiendo un interés creciente a partir de sus posibles aplicaciones en aspectos destacados entre los objetivos para el desarrollo sostenible (ODS) establecidos por la ONU. El objetivo de este trabajo es realizar una revisión bibliográfica sobre estas perspectivas actuales de los óxidos semiconductores, y sus posibles aplicaciones en el campo de la energía y la remediación ambiental. En particular nos centraremos en materiales para sensores y fotocatalisis

METODOLOGÍA:

Se realizará un análisis preliminar del papel de los óxidos semiconductores en relación con los ODS establecidos por la ONU. A continuación se estudiará el potencial real en algunas aplicaciones seleccionadas. Dependiendo de la marcha del trabajo, se planteará la posibilidad de complementarlo con alguna medida experimental relacionadas con aspectos como el sensado de gases o los procesos de fotocatalisis.

BIBLIOGRAFÍA:

Xinge Yu et al, Nature Materials (2016) Vol. 15 (4), 383-396
Ananya Dey et al, Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology, (2018) Vol. 229, 206-217
Photocatalytic Applications of Metal Oxides for Sustainable Environmental Remediation, Danish et al Metals 2021, 11, 80. <https://doi.org/10.3390/met11010080>



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	FISICA DE MATERIALES		
TÍTULO:	Crecimiento y caracterización de materiales magnéticos		
TITLE:	Growth and characterization of magnetic materials		
SUPERVISOR/ES:	A. MASCARAQUE / M.A. GONZALEZ BARRIO		
E-MAIL SUPERVISOR/ES	a.mascaraque@ucm.es / mabarrio@fis.ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☒	Bibliográfico ☐	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒		Selección por expediente ☐

OBJETIVOS:

- Aprender a crecer materiales magnéticos en forma de lámina delgada y nanohilos, a caracterizar sus propiedades estructurales y magnéticas mediante el uso de diferentes técnicas de caracterización del espacio real (microscopia LEEM, microscopia AFM), del espacio recíproco (difracción de Rayos X) y de las propiedades magnéticas (MOKE, microscopia MFM).

METODOLOGÍA:

Para la realización de este trabajo será necesario, inicialmente, revisar la bibliografía de crecimiento y caracterización de materiales magnéticos.

Posteriormente, se plantea la aplicación de varias técnicas experimentales adecuadas para el crecimiento de materiales magnéticos de forma laminar (láminas delgadas) y en forma de nanohilo. Los sistemas 2D se crecerán utilizando métodos físicos de evaporación, mientras que para los nanohilos se utilizará electrodeposición. Para la caracterización se utilizarán diferentes técnicas experimentales. Para la determinación del espacio real se usará microscopia óptica, microscopia de electrones, microscopia de AFM y/o microscopia LEEM. Para la determinación del espacio recíproco se utilizará difracción de rayos X. Para el estudio de las propiedades magnéticas se utilizará la técnica de MOKE y/o la microscopia MFM. En todos los casos, el/la estudiante aprenderá a realizar el/los experimento/s y a analizar los datos obtenidos.

**BIBLIOGRAFÍA:**

- .- Characterization and Measurement of Magnetic Materials, Ed. Elsevier Science. Fausto Fiorillo
- .- Chemical Characterization of Magnetic Materials at High Spatial Resolution, Materials Research Society Symposium Proceedings, NL; Scott, J.
- .- Magnetic force microscopy, U. Hartmann, Materials Science
- .- Magnetic Multilayers, Nanomagnetism and Spintronics, 2009
- .- Magnetism of Surfaces, Interfaces, and Nanoscale Materials, Robert E. Camley, in Handbook of Surface Science, 2015



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Hipertermia con nanohilos		
TITLE:	Hyperthermia with nanowires		
SUPERVISOR/ES:	Patricia de la Presa / Lucas Pérez García		
E-MAIL SUPERVISOR/ES	pmpresa@ucm.es / lucas.perez@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☒	Bibliográfico ☐	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒		Selección por expediente ☐

OBJETIVOS:

- Aprender a crecer y caracterizar estructuralmente nanomateriales ferromagnéticos por electrodeposición.
- Aprender las características fundamentales de la hipertermia magnética y su utilización para liberar energía sin contactos.

METODOLOGÍA:

La hipertermia utilizando campos magnéticos se utiliza de manera habitual para el calentamiento a distancia de fluidos, fundamentalmente en aplicaciones biomédicas pero también en otros campos como la polimerización. Este trabajo tiene dos partes:

Crecimiento por electrodeposición y caracterización (microscopía electrónica y difracción de rayos X) de nanohilos ferromagnéticos, que se realizará en el Departamento de Física de Materiales de la Facultad de Ciencias Físicas.

Caracterización magnética y medida de hipertermia de los nanohilos, que se realizará en el Instituto de Magnetismo Aplicado.

BIBLIOGRAFÍA:

J.M. de Teresa (ed). Nanofabrication. IOP Publishing, Bristol. U.K.

J.M.D. Coey. Magnetism and Magnetic Materials. Cambridge University Press.



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Estudio de la eficiencia de calentamiento de microhilos magnéticos bajo campos de radiofrecuencia. Aplicaciones en hipertermia magnética.		
TITLE:	Study of the heating efficiency of magnetic microwires under radiofrequency fields. Applications in magnetic hyperthermia.		
SUPERVISOR/ES:	Patricia de la Presa y Pilar Marín		
E-MAIL SUPERVISOR/ES:	pmpresa@ucm.es y mpmarin@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☒	Bibliográfico ☐	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒		Selección por expediente

OBJETIVOS:

Los microhilos magnéticos han mostrado ser una fuente muy eficiente de generación de calor cuando se los somete a campos de radiofrecuencia. Este tema ha despertado el interés de la comunidad científica por las diversas aplicaciones que podrían tener. En este trabajo se estudiará cómo se modifican las propiedades físicas de los microhilos variando tanto el número de microhilos como su longitud y el campo aplicado. Se analizarán posibles aplicaciones tecnológicas.

METODOLOGÍA:

- Revisión bibliográfica sobre microhilos magnéticos sometidos a campos de radiofrecuencia
- Se participará en el estudio de las propiedades calorimétricas de los microhilos según su longitud, número de microhilos y campo aplicado.
- Además, se estudiarán sus propiedades magnéticas en campos dc, correlacionando las propiedades magnéticas con las eficiencias de calentamiento.
- Se estudiarán distintas aplicaciones tecnológicas.

BIBLIOGRAFÍA:

I Morales, D Archilla, P de la Presa, A Hernando, P Marín, Scientific Reports 10, 602 (2020)



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Materiales nanoestructurados para aplicaciones en baterías		
TITLE:	Nanostructured materials for applications in batteries		
SUPERVISOR/ES:	Pedro Hidalgo / Bianchi Méndez		
E-MAIL SUPERVISOR/ES	phidalgo@ucm.es / bianchi@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☒	Bibliográfico ☒	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒		Selección por expediente ☐

OBJETIVOS:

- Conocimiento del estado del arte respecto al uso de nanomateriales en baterías.
- Estudio de la relación estructura y propiedades de los sistemas materiales para su uso en dispositivos de almacenamiento de energía.

METODOLOGÍA:

El almacenamiento de energía es un problema de gran interés tanto desde el punto de vista de investigación fundamental como aplicado, siendo un tema prioritario en los programas de financiación europeos.

En este trabajo se llevará a cabo un estudio de las características que deben reunir los materiales que se emplean en el desarrollo de los diversos tipos de baterías, con el objetivo de conseguir sistemas eficientes y duraderos. En particular, se estudiarán los fundamentos físicos de las aproximaciones que usan materiales nanoestructurados, como los nanohilos, nanopartículas y nanomateriales compuestos, y se relacionarán las características morfológicas y estructurales con las propiedades de conducción eléctrica e iónica en los mismos.

Por otra parte, se prevé la realización de experimentos de síntesis y caracterización de algunos de los nanomateriales de interés en este campo, dentro del grupo de investigación "Física de nanomateriales electrónicos" del Departamento.

BIBLIOGRAFÍA:

- Nanomaterials for Rechargeable Lithium Batteries, Peter G. Bruce et al., Angew. Chem. Int. Ed. 47, 2930 – 2946 (2008)
- Recent Advances on Self-Healing Materials and Batteries. Wang, H et al. ChemElectroChem, 6 (6), 1605-1622 (2019).



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Aplicaciones de las cerámicas ferroeléctricas en la industria electrónica como interruptores a pequeña escala.		
TITLE:	Applications of ferroelectric ceramics in the electronics industry as small-scale switches.		
SUPERVISOR/ES:	Yanicet Ortega Villafuerte		
E-MAIL SUPERVISOR/ES:	yanicet@fis.ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☐	Bibliográfico ☒	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒	Selección por expediente ☐	

OBJETIVOS:

- Conocer la microestructura de las cerámicas ferroeléctricas y sus propiedades físicas.
- Resumir las principales aplicaciones de estas cerámicas en la industria electrónica.
- Entender la relación que existe entre el ciclo de histéresis ferroeléctrico y la integración de estas cerámicas en algunos dispositivos electrónicos.
- Simular una aplicación básica de estas cerámicas actuando como interruptores a pequeña escala.

METODOLOGÍA:

- Se partirá para este trabajo bibliográfico de los conocimientos adquiridos en la asignatura de Materiales Cerámicos y en los laboratorios de Ampliación de Física.
- Se realizará una revisión bibliográfica en la que se resuman las principales aplicaciones de las cerámicas ferroeléctricas.
- Se usará el programa Multisim para simular una aplicación en la que se controlen los estados de máxima polarización de una cerámica ferroeléctrica.

BIBLIOGRAFÍA:

- Developments in ferroelectric ceramics for capacitor applications. Bull. Mater. Sci., Vol. 15, No. 5, October 1992, pp. 391-402.
- Ferroelectric Material Application: Modeling Ferroelectric Field Effect Transistor Characteristics from Micro to Nano. <https://doi.org/10.1080/10584589808202057>
- <https://www.multisim.com>



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Superficies con propiedades omnifóbicas		
TITLE:	Surfaces with omniphobic properties		
SUPERVISOR/ES:	Óscar Rodríguez de la Fuente y Noemí Carmona Tejero		
E-MAIL SUPERVISOR/ES:	osrodrig@ucm.es ; ncarmona@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☒	Bibliográfico ☐	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒	Selección por expediente ☐	

OBJETIVOS:

Este trabajo de fin de grado se centra en el estudio de superficies multifuncionales con propiedades oleo- e hidrofóbicas.

METODOLOGÍA:

El TFG comenzará con una revisión bibliográfica; Posteriormente se diseñarán y prepararán varias superficies nano- y micro-estructuradas que presenten poca afinidad a las moléculas de agua y a disolventes orgánicos; Se realizará una caracterización general de las superficies, centrándose en las medidas de ángulo de contacto y energía superficial. Finalmente, se realizará una valoración final de los resultados comparándolos con los de la bibliografía.

BIBLIOGRAFÍA:

- 1) F. Veronesi, G. Boveri, M. Raimondo, Amphiphobic Nanostructured Coatings for Industrial Applications, Materials 12(5) (2019) 787, DOI: 10.3390/ma12050787.
- 2) Y.-C. Sheen, Y.-C. Huang, C.-S. Liao, H.-Y. Chou, F.-C. Chang, New approach to fabricate an extremely super-amphiphobic surface based on fluorinated silica nanoparticles, Journal of Polymer Science, Part B: Polymer Physics 46(18) (2008) 1984-1990.



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Gases de electrones bidimensionales		
TITLE:	Two Dimensional Electron Gases		
SUPERVISOR/ES:	Flavio Bruno		
E-MAIL SUPERVISOR/ES:	fybruno@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☒	Bibliográfico ☐	Simulación ☒
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒	Selección por expediente ☐	

OBJETIVOS:

Comprender y explicar las diferencias en la estructura electrónica y los fenómenos de magneto-transporte de gases de electrones bidimensionales estabilizados en KTaO_3 y SrTiO_3 . Estudiar la relación entre la estructura electrónica y el uso de estos gases bidimensionales en aplicaciones de espintrónica, en particular en la conversión de corrientes de espín en corrientes de carga.

METODOLOGÍA:

El trabajo consistirá en 2 partes diferenciadas:

- 1.- Cálculo de la estructura de bandas de gases de electrones bidimensionales en SrTiO_3 y KTaO_3 utilizando BimPo y comparación con resultados de ARPES. [1]
- 2.- Síntesis de gases bidimensionales y medidas de magneto-transporte de los sistemas simulados en el punto anterior. [2]

Se pondrá más énfasis en la parte experimental o parte de simulación dependiendo del interés del alumno.

BIBLIOGRAFÍA:

- [1] [arXiv:2203.11308 \(2021\)](https://arxiv.org/abs/2203.11308) (descripción de simulaciones).
- [2] [Advanced Electronic Materials 210376 \(2022\)](https://arxiv.org/abs/2103.7621) (comparación de simulación con datos experimentales).
- [3] [arXiv:1612.03571 \(2016\)](https://arxiv.org/abs/1612.03571) (descripción de gases de electrones bidimensionales).



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Recubrimientos sol-gel con inhibidores de la corrosión respetuosos con el medio ambiente para aleaciones ligeras de Mg-Al		
TITLE:	Environmentally friendly sol-gel coatings with corrosion inhibitors for light Mg-Al alloys		
SUPERVISOR/ES:	Noemí Carmona Tejero		
E-MAIL SUPERVISOR/ES	ncarmona@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☒	Bibliográfico ☐	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒	Selección por expediente ☐	

OBJETIVOS:

Este trabajo de fin de grado se centra en el diseño, preparación y caracterización de recubrimientos sol-gel con inhibidores de la corrosión que sean respetuosos con el medio ambiente sobre aleaciones de Mg-Al para aplicaciones en transporte sostenible.

METODOLOGÍA:

El TFG comenzará con una revisión bibliográfica; Posteriormente se diseñarán y prepararán recubrimientos híbridos con inhibidores que serán aplicados en aleaciones ligeras de Mg-Al; Se realizará una caracterización estructural y finalmente se evaluará la resistencia a la corrosión de las superficies preparadas.

BIBLIOGRAFÍA:

L. Rodríguez-Alonso, J. López-Sánchez, A. Serrano, O. Rodríguez de la Fuente, J.C. Galván, N. Carmona, Hybrid sol-gel coatings doped with non-toxic corrosion inhibitors for corrosion protection of AZ61 magnesium alloy, Gels 8, 34 (2022) 1-12.

I. Aldama, V. Barranco, M. Kunowsky, J. Ibañez, J.M. Rojo, Contribution of Cations and Anions of Aqueous Electrolytes to the Charge Stored at the Electric Electrolyte/Electrode Interface of Carbon-Based Supercapacitors, Journal of Physical Chemistry C 121-22, 8 (2017) 12053-12062.

D.J. Carbonell, A. García-Casas, J. Izquierdo, R.M. Souto, J.C. Galván, A. Jiménez-Morales, Scanning electrochemical microscopy characterization of sol-gel coatings applied on AA2024-T3 substrate for corrosion protection, Corrosion Science 111, 1 (2016) 625-636.



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Simulando propiedades electrónicas de materiales laminados MX2 con defectos o/y átomos intercalados		
TITLE:	Simulations of the electronic properties on defective laminated materials		
SUPERVISOR/ES:	César González Pascual		
E-MAIL SUPERVISOR/ES:	cesar.gonzalez@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☐	Bibliográfico ☐	Simulación ☒
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒	Selección por expediente ☐	

OBJETIVOS:

Estudio de las propiedades electrónicas (cálculo de densidad de estados) de estructuras de materiales tipo MX2 con defectos [1]. Análisis energético de las posiciones más favorables de átomos adsorbidos o intercalados [2].

METODOLOGÍA:

Aprendizaje de la metodología de la teoría del funcional de la densidad (DFT). Manejo del código DFT-FIREBALL [3]. Creación de superceldas para la determinación de las estructuras más estables con diferentes defectos y/o átomos intercalados. Uso de la metodología DFT para llevar a cabo simulaciones de barreras energéticas y movilidad atómica.

BIBLIOGRAFÍA:

- [1] C González, B Biel and Y J Dappe, Nanotechnology **27**, 105702 (2016)
- [2] E. Cha, et al. Nature Nanotechnology **13** 337–344 (2018)
- [3] J. P. Lewis Phys. Status Solidi B **248**, 1989–2007 (2011)



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Cálculos de primeros principios de la estructura electrónica de nanopartículas		
TITLE:	First principle calculations of the electronic structure of nanoparticles		
SUPERVISOR/ES:	Elena Díaz García y Ruth Martínez Casado		
E-MAIL SUPERVISOR/ES	elenadg@ucm.es / mariarum@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental	Bibliográfico X	Simulación X
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa X		Selección por expediente ☐

OBJETIVOS: Familiarizar al alumno con las técnicas de investigación en física teórica de la materia condensada basadas en cálculos de primeros principios de la estructura electrónica de nanopartículas híbridas. Explorar el estado del arte de los análisis numéricos basados en la teoría funcional de densidad para obtener información de la estructura de bandas de nanopartículas semiconductoras híbridas.

METODOLOGÍA: Recientemente un equipo interdisciplinar con investigadores de la UCM ha demostrado que el rendimiento cuántico de nanopartículas luminiscentes en el NIR-II basadas en Ag/Ag₂S se incrementa en casi dos órdenes de magnitud a través de tratamientos superficiales de tipo óptico o químico, lo que unido a su nula toxicidad resulta fundamental para su aplicación en investigación clínica [1]. Sin embargo estos estudios son muy recientes y todavía requieren de un análisis teórico exhaustivo para un diseño óptimo del método de síntesis de estas superestructuras. La interpretación teórica de los procesos de fluorescencia de las nanopartículas híbridas requieren un complejo tratamiento cuántico para poder obtener una descripción detallada del material híbrido Ag/Ag₂S mediante primeros principios. Para aportar un poco de luz en las propiedades de esta interfaz se puede utilizar la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). El código utilizado será CRYSTAL17, que ha sido implementado de forma muy eficiente para realizar estudios de compuestos en los que hay presencia de elementos metálicos como el Ag. En particular, el funcional utilizado será el Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE), que ha demostrado describir de forma correcta la estructura electrónica y propiedades ópticas de materiales con elementos metálicos [2,3].

BIBLIOGRAFÍA:

[1] A. Ortega-Rodríguez et al. *10-Fold Quantum Yield Improvement of Ag₂S Nanoparticles*



by Fine Compositional Tuning. ACS Applied Materials & Interfaces **12** (2020) 12500.

[2] R. Dovesi et al. Quantum-mechanical condensed matter simulations with CRYSTAL. WIREs Comput. Mol. Sci. **8**, (2018) e1360 (2018).

[3] R. Martínez-Casado et al. A hybrid-exchange density functional study of the bonding and electronic structure in bulk CuFeS₂. J. Chem. Phys. **144**, (2016) 184702 .



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Micro y nanoestructuras basadas en óxidos semiconductores con aplicaciones en baterías de ion-Litio		
TITLE:	Semiconducting oxide-based micro and nanostructures for Lithium-ion battery applications		
SUPERVISOR/ES:	David Maestre Varea		
E-MAIL SUPERVISOR/ES:	dmaestre@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☐	Bibliográfico ☒	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☒		Selección por expediente ☐

OBJETIVOS:

En las próximas décadas el sector del almacenamiento de energía jugará un papel determinante en el proceso de descarbonización y aceleración de la transición hacia una economía sostenible, ofreciendo además un sistema energético flexible y versátil. En concreto, en los últimos años las baterías de ion-Litio (LiB) han revolucionado la tecnología de almacenamiento de energía en dispositivos portátiles y están llamadas a adquirir un creciente protagonismo en redes eléctricas o vehículos eléctricos, entre otros [1]. Una correcta elección y conocimiento de los materiales que conforman los componentes de las baterías es determinante para mejorar la capacidad de respuesta, la potencia de almacenamiento de energía, la ciclabilidad y durabilidad, por lo que en los últimos años la comunidad científica está investigando diferentes materiales que promuevan el desarrollo de dispositivos más eficientes y respetuosos con el medioambiente.

- El principal objetivo del TFG es realizar una revisión bibliográfica de la investigación actual acerca de nanomateriales basados en óxidos semiconductores empleados como electrodos en baterías de ion Li [2, 3].
- Como objetivo secundario, en el TFG también se estudiarán diversas técnicas de caracterización de estos nanomateriales, incluyendo técnicas de caracterización in-situ.

METODOLOGÍA:

- Aprendizaje de herramientas de búsqueda bibliográfica.
- Organización y análisis de la información recogida y revisión bibliográfica.
- Discusión y análisis de resultados



BIBLIOGRAFÍA:

- [1] Issues and challenges facing rechargeable lithium batteries. J. M. Tarascon y M. Armand. *Nature*, **414** (6861), 359-367 (2001).
- [2] High-Energy Density Core–Shell Structured $\text{Li}[\text{Ni}_{0.95}\text{Co}_{0.025}\text{Mn}_{0.025}]\text{O}_2$ Cathode for Lithium-Ion Batteries D-W. Jun, C. S. Yoon, U.-H. Kim, Y.-K. Sun. *Chem. Mater*, **29**, 5048-5052 (2107).
- [3] Nanostructured high-energy cathode materials for advanced lithium batteries. Y.-K. Sun, Z. Chen, H.-J. Noh, D.-J. Lee, H.-G. Jung, Y. Ren, S. Wang, C. S. Yoon, S.-T. Myung, K. Amine, *Nature Materials*, **11**, 942-947 (2012).



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Desarrollo y caracterización de nanoestructuras magnéticas para detección de biomarcadores por medio de métodos alternativos, rápidos y sensibles		
TITLE:	Development and characterisation of magnetic nanostructures for biomarker detection using alternative, rapid and sensitive methods.		
SUPERVISOR/ES:	Patricia de la Presa y Daniel Matatagui		
E-MAIL SUPERVISOR/ES	pmpresa@ucm.es y daniel.m.c@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	2		
TIPO DE TFG:	Experimental ☒	Bibliográfico ☐	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☐	Selección por expediente ☒	

OBJETIVOS:

Participar en el desarrollo de nuevas nanoestructuras magnéticas [1] dirigidas hacia una interacción con biomarcadores [2,3] que permita detectar la presencia de estos en el aliento exhalado [4]. Una vez obtenidas las nanoestructuras se llevará a cabo una caracterización de las mismas mediante un amplio abanico de técnicas que permitan determinar tanto su composición, morfología y propiedades magnéticas. Además, se estudiará la interacción nanoestructura-biomarcador para determinar propiedades como la sensibilidad y selectividad.

METODOLOGÍA:

- Desarrollo de diferentes nanoestructuras magnéticas mediante el proceso de molienda mecánica (principalmente ferritas).
- Aplicación de técnicas como SEM-EDX (Scanning Electron Microscopy - Energy Dispersive X-ray spectroscopy) y magnetómetros para caracterización de las muestras obtenidas.
- Caracterización con biomarcadores obtenidos mediante generadores de gases para determinar la interacción nanoestructura-biomarcador.



BIBLIOGRAFÍA:

1. Pozo, G.; De La Presa, P.; Prato, R.; Morales, I.; Marin, P.; Fransaer, J.; Dominguez-Benetton, X. Spin transition nanoparticles made electrochemically. *Nanoscale* **2020**, *12*, 5412–5421.
2. Pozo-Gomez, M.; Aguilera-Martin, J.D.; De La Presa, P.; Cruz, C.; Marin, P.; Matatagui, D.; Horrillo, M.C. Modeling and simulation of a magnonic gas sensor to detected diseases in human breath. In Proceedings of the Proceedings of the 2021 13th Spanish Conference on Electron Devices, CDE 2021; 2021; pp. 125–128.
3. Matatagui, D.; Kolokoltsev, O.V.; Qureshi, N.; Mejía-Uriarte, E.V.; Ordoñez-Romero, C.L.; Vázquez-Olmos, A.; Saniger, J.M. Magnonic sensor array based on magnetic nanoparticles to detect, discriminate and classify toxic gases. *Sensors Actuators, B Chem.* **2017**, *240*.
4. Giorgio Pennazza, Marco Santonico, Introduction. Breathprinting: What, Why, How, Academic Press, 2019, ISBN 9780128145623.



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	FISICA DE MATERIALES		
TÍTULO:	Dicalcogenuros de metales de transición		
TITLE:	Transition metal dichalcogenides		
SUPERVISOR/ES:	A. MASCARAQUE / M.A. GONZALEZ BARRIO		
E-MAIL SUPERVISOR/ES	a.mascaraque@ucm.es / mabarrio@fis.ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☐	Bibliográfico ☒	Simulación ☐
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☐		Selección por expediente ☒

OBJETIVOS:

.- Conocer y comprender las propiedades físicas particulares de los materiales laminares y su relación con la baja dimensionalidad.

Los materiales laminares constituyen una familia creciente de materiales 2D con propiedades emergentes, que incluye a los aislantes topológicos 2D y a los dicalcogenuros de metales de transición. Estos últimos, con formula general MX_2 , donde M es un metal de transición (Mo, W, etc.), y X un anfígeno (S, Se or Te), pueden ser semiconductores, semimetales o incluso superconductores. Recientemente, el MoS_2 , por ejemplo, ha recibido gran atención como un material prometedor en variedad de aplicaciones en electrónica, espintrónica, catálisis, como sensor de gas, biosensor, material fotovoltaico o para almacenamiento de energía.

METODOLOGÍA:

Para la realización de este trabajo será necesario, inicialmente, revisar la bibliografía en TMDs.

.- Estudio de la bibliografía recomendada.

.- Análisis de la situación actual a través de algunos artículos científicos relevantes sobre aplicaciones del tema.

Posteriormente, se plantean varias posibles aproximaciones entre las que el o la estudiante deberá elegir al menos una:

.- Estudio de las propiedades fisicoquímicas de los TMDs.

.- Aplicaciones actuales y futuras de los TMDs.



BIBLIOGRAFÍA:

Manzeli, S. et al., 2D transition metal dichalcogenides. *Nat Rev Mater* **2** (2017) 17033.

<https://doi.org/10.1038/natrevmats.2017.33>

Choi, W. et al. Recent development of two-dimensional transition metal dichalcogenides and their applications. *Materials Today* **20** (2017) 116-130.

<https://doi.org/10.1016/j.mattod.2016.10.002>.

D.L.Duong et al., van der Waals Layered Materials: Opportunities and Challenges.



GRADO EN INGENIERÍA DE MATERIALES

Curso 2022-23

Ficha de Trabajo Fin de Grado

DEPARTAMENTO:	Física de Materiales		
TÍTULO:	Física del estado sólido en óxidos a partir de simulaciones de primeros principios		
TITLE:	Solid State Physics in oxides from first principles simulations		
SUPERVISOR/ES:	Juan Ignacio Beltrán Fínez		
E-MAIL SUPERVISOR/ES:	juanbelt@ucm.es		
NÚMERO DE PLAZAS:	1		
TIPO DE TFG:	Experimental ☐	Bibliográfico ☐	Simulación ☒
ASIGNACIÓN DE TFG:	Selección directa ☐	Selección por expediente ☒	

OBJETIVOS:

La teoría del funcional de la densidad (DFT) es una herramienta de simulación muy empleada en la física de materiales para apoyar estudios experimentales pero también para predecir propiedades novedosas, basado en su gran capacidad de ingeniería atómica. El objetivo del TFG será usar un código DFT para simular las propiedades electrónicas (densidades de estados ...), estructurales (módulo de elasticidad...) y/o magnéticas (magnetización ...) de diversos óxidos con estructura perovskita.

METODOLOGÍA:

Se simulará una serie de materiales usando DFT para tomar consciencia de las fortalezas y deficiencias en dicha teoría así como las necesarias correcciones para su empleo en materiales con correlación electrónica. Para realizar dichas simulaciones el candidato necesitará usar un ordenador portátil con conexión inalámbrica para conectarse en remoto a un centro de computación de alto rendimiento.

BIBLIOGRAFÍA:

“Error Estimates for Solid-State Density-Functional Theory Predictions: An Overview by Means of the Ground-State Elemental Crystals”, Critical Reviews in Solid State and Materials Sciences, 39:1, 1-24 (2014). DOI: 10.1080/10408436.2013.772503