

MÁSTER EN FÍSICA

CURSO 2023/24

17 TEMAS DE TRABAJO FIN DE MÁSTER PROPUESTOS

EN LA MENCIÓN DE

FÍSICA DE MATERIALES

Nº de TFM	Título	Tutor/es	Resumen
1	Estudio de la influencia de los pesos moleculares en la estructura celular de nanocompuestos de poliestireno. <u>Temática:</u> materiales celulares	Karina C. Núñez C.	[ENLACE]
2	Obtención de polímeros termoplásticos hiperramificados (Star-Shape Polymer). Un entrecruzamiento físico sostenible. <u>Temática:</u> materiales celulares	Karina C. Núñez C.	[ENLACE]
3	Materiales inteligentes con redes covalentes adaptativas para alcanzar la sostenibilidad de materiales poliméricos celulares: ESPUMAS VITRIMERICAS <u>Temática:</u> materiales celulares	Karina C. Núñez C.	[ENLACE]
4	Desarrollo y caracterización de materiales porosos ultrarresistentes <u>Temática:</u> materiales porosos	Alberto Tena Matías Mónica de la Viuda	[ENLACE]
5	Desarrollo de condensados sintéticos mediante microfluídica para ingeniería metabólica <u>Temática:</u> biomateriales	José Carlos Rodríguez Cabello Sergio Acosta Rodríguez	[ENLACE]
6	Caracterización de hidrogeles proteicos con transición UCST para ingeniería de tejidos <u>Temática:</u> biomateriales	José Carlos Rodríguez Cabello Sergio Acosta Rodríguez	[ENLACE]
7	Termodinámica de los sistemas 1-alcohol + anhídrido orgánico: efectos interaccionales y estructurales <u>Temática:</u> termodinámica de materiales	Luis Fernando Hevia de los Mozos Daniel Lozano Martín	[ENLACE]
8	Estudio arqueométrico de materiales históricos y arqueológicos <u>Temática:</u> caracterización de materiales	Suset Barroso Solares	[ENLACE]

9	Espectroscopia Raman y LIBS en misiones de exploración in-situ de Marte: Clasificación de Materiales Ígneos mediante métodos de Machine Learning <u>Temática:</u> caracterización de materiales	Guillermo López Reyes José Antonio Manrique Martínez	[ENLACE]
10	Guías de Ondas Lineales (Line-Wave Waveguides) <u>Temática:</u> metamateriales	Ana Grande Ismael Barba Ana C. López	[ENLACE]
11	Estudio teórico-numérico de un demultiplexor de paredes magnéticas en pistas ferrimagnéticas <u>Temática:</u> materiales magnéticos	Luis Sánchez-Tejerina Óscar Alejos Ducal	[ENLACE]
12	Estudio experimental de mecanismos termoeléctricos en Memristores de Óxido de Hafnio <u>Temática:</u> semiconductores	Salvador Dueñas Carazo Héctor García García	[ENLACE]
13	Nanomateriales para Computación Cuántica: Qubits basados en tecnología de Silicio <u>Temática:</u> semiconductores	Jorge Serrano Gutiérrez Óscar Martínez Sacristán	[ENLACE]
14	Caracterización, mediante técnicas de microscopía óptica, de compuestos III-V con N diluido <u>Temática:</u> semiconductores	Oscar Martínez Sacristán	[ENLACE]
15	Estudio de la generación de centros de color en diamante por interacción de defectos puntuales mediante simulaciones atomísticas <u>Temática:</u> semiconductores	Iván Santos Tejido Luis A. Marqués Cuesta	[ENLACE]
16	Estudio de propiedades estructurales y dinámicas del Fe líquido a altas presiones y temperaturas mediante simulaciones de primeros principios y redes neuronales <u>Temática:</u> nanomateriales	Beatriz G del Rio	[ENLACE]
17	Aplicación de la Inteligencia Artificial al almacenamiento de hidrógeno en COFs (Covalent-Organic Frameworks) a temperatura ambiente y presiones moderadas <u>Temática:</u> nanomateriales	Iván Cabria Álvaro	[ENLACE]

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 1

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Estudio de la influencia de los pesos moleculares en la estructura celular de nanocompuestos de poliestireno.
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Dra. Karina C. Núñez Física de la materia condensada (Cellmat Laboratory)

Resumen y objetivos:

La idea de esta investigación gira en torno a la importancia de los materiales poliméricos celulares (espumas) por su excelente relación propiedades-densidad, en comparación con sus homólogos sólidos. Además, gracias a su estructura interna, son ideales para el aislamiento térmico, acústico y eléctrico y poseen alta absorción de energía, entre otras características; que los convierten en materiales interesantes para contribuir a los retos de sostenibilidad actuales.

La posibilidad de modificar la estructura de los materiales celulares, modificando los parámetros de fabricación, permite diseñar materiales a medida. Investigaciones previas han demostrado que la inclusión de partículas en la matriz polimérica es una buena estrategia para mejorar las propiedades aislantes de un polímero celular y en nuestros últimos trabajos hemos demostrado que incluir nanopartículas, durante el propio proceso de fabricación del material, es crucial para crear una red de percolación que permite maximizar el comportamiento de los materiales celulares fabricados, a partir de ellos.

El objetivo de esta investigación es por tanto, seguir avanzando en este conocimiento. Esta vez haciendo énfasis en el tamaño, en las ramificaciones y en la conformación de las cadenas poliméricas de estireno dentro del nanocompuesto usado para la fabricación de materiales celulares, usados para aislamiento térmico.

Se modelará por tanto nuevas microestructuras en nanocomposites de poliestireno que permitirá identificar la adecuada relación estructura-propiedades para explotar el beneficio de la nanotecnología en la obtención de estructura poliméricas celulares (espumas), usadas como aislantes térmicos. Con ello, se pretende contribuir al objetivo de sostenibilidad energética que se demanda en la actualidad.

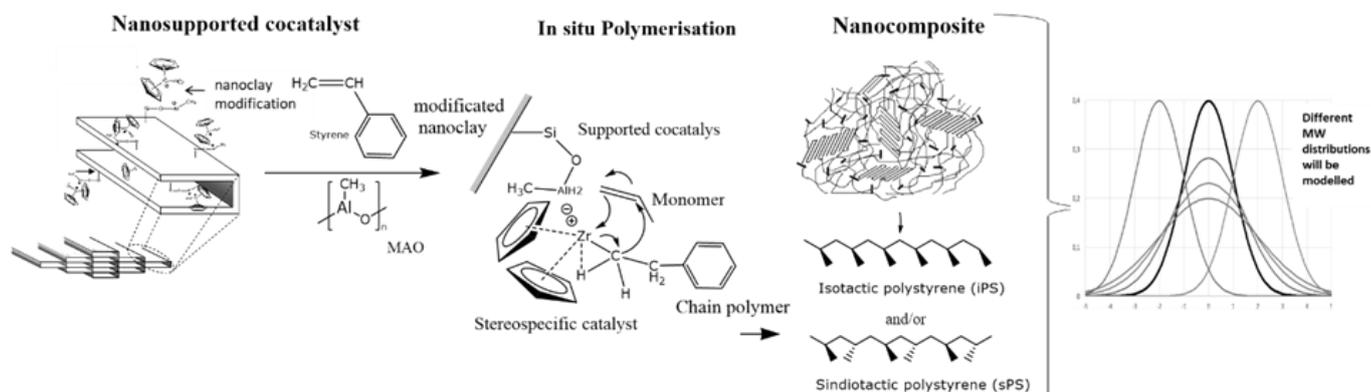


Figura. Estudio del nanocompuesto de estireno con distintas conformaciones y configuraciones

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 2

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Obtención de polímeros termoplásticos hiperramificados (Star-Shape Polymer). Un entrecruzamiento físico sostenible.
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Karina C. Núñez C. Física de la materia condensada (Cellmat Laboratory)

Resumen y objetivos:

La idea central de la investigación es estudiar una alternativa para reemplazar los polímeros termoestables o los termoplásticos entrecruzados (no reciclables). Actualmente, estos materiales son usados, masivamente, en la obtención de “composites” o materiales reforzados con fibras de vidrio o de carbono, para aplicaciones estructurales en sector aeronáutico, construcción, automoción, etc. Incluso se fabrican materiales termoplásticos entrecruzados para la fabricación de estructuras celulares más resistentes como las espumas poliolefinicas, de acrilatos o de poliamidas.

El objetivo técnico es reemplazar estos materiales (entrecruzamiento químico) por polímeros termoplásticos con un enmarañamiento tridimensional (entrecruzamiento físico), que, per se, sean reciclables mecánicamente (por fusión); pero con una conformación hiperramificada, en forma de estrella, que permita alcanzar las propiedades reológicas adecuadas para los procesos de moldeo, durante la fabricación de los productos; sin olvidar requerimientos mecánicos durante su vida útil y la eficiencia de su proceso de reciclado.

Finalmente, la ejecución de la investigación tendrá como resultado el establecimiento de la relación de la estructura del material ramificado con sus propiedades finales (reológicas, mecánicas, térmicas, sostenibilidad, etc.) en estructuras celulares y/ó en materiales compuestos.

Estructura

▸ **Lineal**



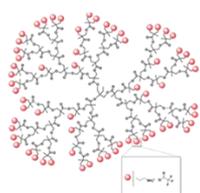
▸ **Ramificado**



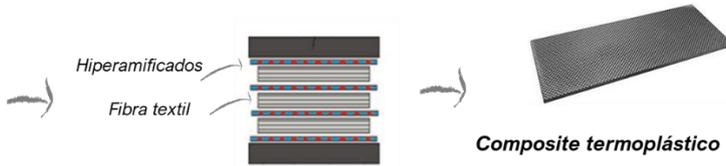
▸ **Entrecruzado**



▸ **Estrella**



Material ramificado



Fabricación de preforma

Composite termoplástico

Alta compatibilidad
Baja energía y cortos tiempos de fabricación
Mayor capacidad de soldadura

Aplicación de materiales ramificados en la fabricación de composites

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 3

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Materiales inteligentes con redes covalentes adaptativas para alcanzar la sostenibilidad de materiales poliméricos celulares: ESPUMAS VITRIMERICAS
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Karina C. Núñez C. Física de la materia condensada (Cellmat Laboratory)

Resumen y objetivos:

Actualmente hay dos visiones para afrontar el reto de la sostenibilidad de los materiales poliméricos: una visión curativa y una visión preventiva. En el primer caso entendemos que la sociedad ya ha generado y sigue generando cantidades importantes de residuos plásticos que deben ser tratados y reinsertados en un tipo de economía circular, es decir, el problema existe y se debe buscar solución, reusando los materiales ya existentes. En la segunda visión, entendemos que podemos diseñar soluciones que eviten la generación de residuo, es decir, materiales que desde su origen esten preparados para ser sostenibles. Así pues, se habla de materiales auto reparables o inteligentes, biomateriales, materiales compostables, ecodiseño de piezas etc.

La idea de este trabajo es estudiar en un enfoque curativo, el potencial de injertar enlaces tipos CLICK (abre y cierra) a estructuras poliméricas termoestables o termoplásticas (según la aplicación) y crear estructuras tridimensionales que permitan mejorar/mantener sus propiedades, durante su vida útil y aumentar su reciclabilidad, al mismo tiempo, una vez que son desecho.

El principio se basa en que durante la vida útil de estos materiales modificados, se forma una red que este unida covalentemente. Al darle un estímulo físico, la red se rompe y las cadenas residuales se separan y por ende, son más fácilmente reciclable. Esta respuesta puede ser reversible o no (ej. vitrimeros). La finalidad última del trabajo fin de grado es diseñar y crear un primer boceto de funcionamiento de este “nuevo tipo de materiales inteligentes”. Para ello se diseñarán tanto los materiales, como los estímulos físicos a los que responderán; para evaluar, en conjunto, el potencial de la tecnología en la sostenibilidad de los materiales plásticos, especialmente en estructura celulares entrecruzadas (ej. espumas entrecruzadas poliolefinicas).

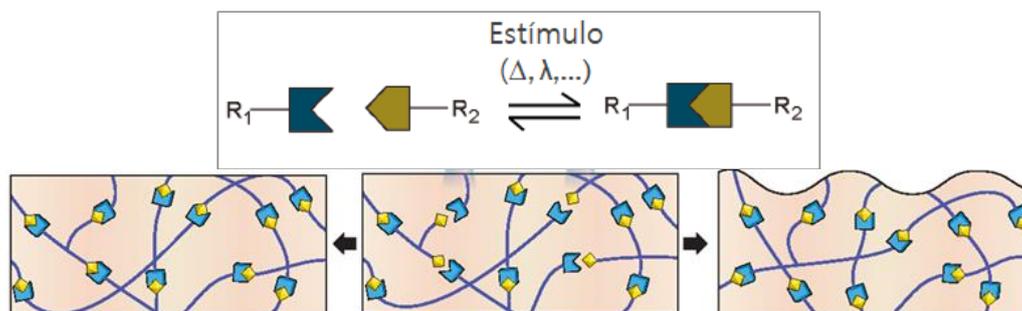


Figura: Redes tridimensionales adaptativas

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 4

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Desarrollo y caracterización de materiales porosos ultrarresistentes
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Alberto Tena Matías, Mónica de la Viuda (Departamento de Física Aplicada – GIR SMAP)
<p>Resumen y objetivos del TFM:</p> <p>Las membranas son empleadas como alternativa sostenible en multitud de procesos de separación como por ejemplo membranas porosas en procesos de purificación de agua. Sin embargo, existen desafíos tecnológicos donde los materiales no son eficientes, sobre todo relacionados con condiciones extremas. Uno de estos problemas surge, por ejemplo, en la separación de disolventes o compuestos orgánicos en fase líquida.</p> <p>En este trabajo se propone el desarrollo de membranas porosas con resistencia extrema a disolventes orgánicos. Para ello se cubrirán todas las fases desde la formación de las membranas, hasta la caracterización de las propiedades físicas de la misma, así como la demostración de su resistencia frente a disolventes orgánicos en comparación con los materiales aplicados actualmente en la industria de membranas.</p> <p>Los objetivos a conseguir por el estudiante son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Conocer y aplicar técnicas de fabricación de membranas empleadas por la industria • Emplear técnicas de caracterización de materiales que permitan tener un conocimiento lo más completo posible (caracterización estructural, propiedades físicas y caracterización funcional) 	

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 5

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Desarrollo de condensados sintéticos mediante microfluídica para ingeniería metabólica
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	José Carlos Rodríguez Cabello, Sergio Acosta Rodríguez (Física de la materia condensada, BIOFORGE)
<p>Resumen y objetivos del TFM:</p> <p>La separación de fases líquido-líquido de biomoléculas en condensados ha surgido como un mecanismo para la organización intracelular y afecta a muchos procesos celulares, como el control de la expresión génica o el de muchas reacciones enzimáticas que se producen dentro de la célula. Este control se logra gracias a que las células son capaces de regular (espacio-temporalmente) el tamaño de los condensados. Sin embargo, los procesos físicos que rigen la distribución de tamaños de los condensados siguen siendo poco claros.</p> <p>Este TFM tiene como objetivo estudiar la distribución espacial de condensados sintéticos para el desarrollo de microdispositivos para ingeniería metabólica. Para ello, a partir de polímeros proteicos que presentan separación de fases líquido líquido (llamados elastin-like recombinamers o ELRs) se producirán microgotas mediante microfluídica. Estas gotas servirán para trazar la agregación de los ELRs mediante microscopía confocal. Se evaluarán las propiedades mecánicas de los mismos mediante técnicas avanzadas de caracterización como microreología y la cinética de difusión mediante FRAP (Fluorescence recovery after photobleaching).</p> <p>El estudio de condensados sintéticos basados en ELRs con distintas composiciones permitirá sentar las bases de los principios que gobiernan sobre la formación de los mismos y su estabilidad en el tiempo, permitiendo así la creación de dispositivos avanzados para ingeniería metabólica y biología sintética.</p>	

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 6

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Caracterización de hidrogeles proteicos con transición UCST para ingeniería de tejidos
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	José Carlos Rodríguez Cabello, Sergio Acosta Rodríguez (Física de la materia condensada, BIOFORGE)
<p>Resumen y objetivos del TFM:</p> <p>Los polímeros proteicos con transiciones de fase líquido-líquido han revolucionado el campo de la biomedicina. Bioinspirados en proteínas estructurales como la elastina y resilina, presentan unas propiedades mecánicas únicas para su uso como scaffolds para la regeneración de tejidos. En este contexto, los polímeros bioinspirados en la resilina son especialmente relevantes por su capacidad de presentar transiciones de fase UCST y LCST (upper and lower critical solution temperature, respectivamente)</p> <p>Este TFM tiene como objetivo la caracterización de polímeros recombinantes con transiciones de fase UCST y LCST, con el objetivo de elucidar las variables que controlan su capacidad y cinética de autoensamblado en nanoestructuras jerárquicas.</p> <p>El estudiante adquirirá experiencia en la caracterización física de polímeros proteicos con alto valor en bioingeniería y biomedicina. Se estudiarán las transiciones de fase (UCST y LCST) mediante turbidimetría y calorimetría diferencial de barrido (DSC). La cinética de autoensamblado y las nanoestructuras resultantes se monitorizarán mediante Dynamic Light Scattering (DLS) y microscopía confocal, así como las propiedades viscoelásticas del hidrogel mediante reología.</p> <p>De este modo, el estudiante tendrá la oportunidad de adentrarse en la biofabricación y caracterización de hidrogeles avanzados para su uso como scaffolds para medicina regenerativa e ingeniería tisular.</p>	

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 7

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Termodinámica de los sistemas 1-alcohol + anhídrido orgánico: efectos interaccionales y estructurales
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Luis Fernando Hevia de los Mozos, Daniel Lozano Martín Departamento de Física Aplicada Grupo Especializado en Termodinámica de los Equilibrios entre Fases (GETEF)

Resumen y objetivos del TFM:

Contexto: Los líquidos orgánicos están formados por moléculas que incluyen varios **grupos funcionales** (básicamente, grupos de átomos con una estructura dada). Sus propiedades termodinámicas están influidas por la disposición y tipo de átomos que forman estos grupos y de su posición en la molécula. Estos factores determinan las **interacciones inter e intramoleculares** y la **estructura** del líquido (organización de sus moléculas), pudiendo incluso llegar a determinar si una molécula puede ser considerada una entidad plenamente independiente en el líquido o si, por el contrario, los grados de libertad de moléculas vecinas dependen unos de otros (como en el caso de las moléculas de agua, unidas por puentes de hidrógeno).

Estos factores interaccionales y estructurales **actúan de forma colectiva**, siendo en ocasiones difíciles de analizar por separado. Una forma de proceder es **estudiar mezclas de líquidos cuyas moléculas contienen grupos funcionales que contienen determinado tipo de átomos (por ejemplo, C y O), pero variando el número de átomos y/o su disposición geométrica.**

En el GETEF se ha investigado, dentro del llamado **proyecto OCO**, mezclas formadas por moléculas que contienen grupos con C y O pero con diferente estructura y tamaño: -O- (éteres); CO (cetonas); OCO (ésteres); OCOO (carbonatos orgánicos); o CO-O-CO (anhídridos). En particular, se han investigado los sistemas formados por uno de estos compuestos y alcanos (que facilitan el estudio del efecto del tamaño del grupo funcional), o 1-alcóholes (que ayudan a la comprensión de los puentes de hidrógeno inter e intramoleculares). Dentro del proyecto OCO, se han estudiado extensamente, tanto de forma experimental como teórica, las mezclas **1-alcohol + éter, o + cetona, o + éster, o + carbonato orgánico**, faltando por investigar los sistemas que contengan **anhídridos orgánicos**. Este es el objeto de presente trabajo fin de máster.

Objetivo general: Estudio de los efectos interaccionales y estructurales en mezclas líquidas de 1-alcohol + anhídrido acético, o + anhídrido butanoico.

Objetivos específicos:

- 1) Formación del estudiante en dos técnicas experimentales: la microcalorimetría Tian-Calvet para la determinación de entalpía de mezcla (energía liberada o absorbida en forma de calor al mezclar dos líquidos) y la densimetría de tubo vibrante para la determinación de volumen de mezcla (cambio en el volumen total al mezclar dos líquidos).
- 2) Determinación experimental de las entalpías y volúmenes de mezcla de los sistemas seleccionados.
- 3) Análisis de los resultados obtenidos en términos las interacciones y estructura de las mezclas.
- 4) Aplicación de teorías, bien fundamentadas desde el punto de vista de la Física Estadística, para interpretar y comprender en mayor profundidad los resultados experimentales. Por ejemplo, del modelo DISQUAC (modelo puramente físico desarrollado ampliamente por el grupo GETEF y con muy buenos resultados) y del modelo ERAS (que considera los puentes de hidrógeno entre moléculas iguales o distintas).

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 8

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Estudio arqueométrico de materiales históricos y arqueológicos
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Suset Barroso Solares Departamento de Física de la Material Condensada, Cristalografía y Mineralogía Grupo de Investigación Reconocido AHMAT

Resumen y objetivos del TFM:

¿Cómo fabricaban nuestros antepasados sus materiales? ¿Qué relaciones comerciales existían entre pueblos de la península Ibérica antes de la romanización? ¿Por qué algunos de nuestros monumentos se deterioran con facilidad? ¿Qué pigmentos empleaban los artistas del Renacimiento para pintar sus obras maestras? Las respuestas a dichas preguntas requieren de la colaboración de investigadores expertos en diversos campos, entre ellos la ciencia de materiales. El análisis de la composición, estructura, morfología y propiedades de los materiales arqueológicos o del patrimonio histórico-artístico permite realizar contribuciones esenciales para dar con esas respuestas. En este proyecto se llevará a cabo un estudio de una selección de muestras arqueológicas o del patrimonio histórico-artístico mediante diversas técnicas experimentales físico-químicas, con el objetivo de entender mejor nuestro pasado y la conservación de nuestro patrimonio.

Este trabajo permitirá al alumno familiarizarse con una amplia selección de técnicas experimentales de gran relevancia en la Ciencia de Materiales, como son la espectroscopía Raman, espectroscopía Infrarroja, difracción de rayos X, fluorescencia de rayos X, microscopía óptica, microscopía electrónica, análisis termogravimétrico, entre otras. Igualmente, se podrán emplear diversas técnicas de análisis de datos, incluyendo análisis multivariable.

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 9

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Espectroscopia Raman y LIBS en misiones de exploración in-situ de Marte: Clasificación de Materiales Ígneos mediante métodos de Machine Learning
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Guillermo López Reyes (Profesor Tutor); Jose Antonio Manrique Martínez (Co-tutor) GIR ERICA (Espectroscopia Raman e Infrarroja Aplicada a la Cosmogeología y Astrobiología). Departamento de Física Aplicada.
<p>Resumen y objetivos del TFM:</p> <p>El grupo de investigación ERICA participa en las misiones Mars 2020 de la NASA y ExoMars de la ESA, mediante la aplicación de la espectroscopía Raman y LIBS para la interpretación mineralógica in-situ de la superficie de Marte.</p> <p>En el ámbito geológico de Marte, toman especial interés mineralógico las muestras de origen volcánico como olivinos y algunos feldespatos como las plagioclasas, por su alta ocurrencia en la superficie marciana, pero también por la historia geológica que puede interpretarse a partir del análisis de las concentraciones de cationes en estos minerales. En concreto, los olivinos y plagioclasas son Soluciones Sólidas sustitutivas, donde se intercambian cationes de Fe y Mg, o de Ca y Na, respectivamente. Estas sustituciones permiten obtener todas las posibles mezclas entre los extremos de la solución: de Fayalita (Fa, 100% Fe) a Forsterita (Fo, 100% Mg) en olivinos, y de Anortita (An, 100% Ca) a Albita (Ab, 100% Na) en plagioclasas.</p> <p>Estas sustituciones catiónicas modifican la respuesta espectral del material, de manera que es posible calcular rectas de calibrado que permitan extrapolar el ratio Fe/Mg en olivinos y An/Ab en plagioclasas. En este trabajo se propone la aplicación de métodos de Machine Learning para mejorar las rectas de calibrado existentes para estos materiales ígneos. Para ello, se proponen los siguientes objetivos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Analizar un conjunto de muestras de olivinos, plagioclasas y otros feldespatos relevantes con diferentes instrumentos Raman, contribuyendo a la base de datos de espectros de análogos marcianos del grupo de investigación • Estudio de las rectas de calibrado existentes en la literatura para clasificar soluciones sólidas • Implementación de metodologías de análisis multivariante y aprendizaje automático para entrenar modelos de clasificación: entrenamiento, validación y test. • Aplicación de las rectas y comparativa con los resultados obtenidos por el instrumento SuperCam y otros instrumentos del rover Perseverance <p>El trabajo se realizará mediante Matlab o Python. No es necesaria experiencia previa en técnicas de aprendizaje automático.</p>	

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 10

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Guías de Ondas Lineales (Line-Wave Waveguides)
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Ana Grande, Ismael Barba, Ana C. Lopez (Grupo de Electromagnetismo Computacional GRECO)
Resumen y objetivos del TFM: Se conoce como "onda lineal" ("line-wave") a un modo electromagnético que puede aparecer en la interfaz entre dos superficies de características complementarias (conductor eléctrico y magnético, superficie inductiva y capacitiva, etc.) si se dan ciertas condiciones. Para cumplir con las mismas, es necesario el diseño de superficies que tengan las propiedades correctas. Una vez generada la onda, ésta se propaga a lo largo de la interfaz, desvaneciéndose si nos alejamos de la misma, por ello, desde su descubrimiento en 2014, diferentes grupos de investigación trabajan en su potencial uso para guiar señales electromagnéticas. En este trabajo se pretende realizar un repaso del estado del arte en el tema, así como un diseño y caracterización de una guía de ondas y su conexión con una guía convencional. Se dispone de resultados previos utilizando estructuras basadas en la conocida "cruz de Jerusalén", si bien se podrán probar otros diseños.	

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 11

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Estudio teórico-numérico de un demultiplexor de paredes magnéticas en pistas ferrimagnéticas
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Luis Sánchez-Tejerina y Óscar Alejos Ducal. Departamento de Electricidad y Electrónica GIR Materiales Magnéticos

Resumen y objetivos del TFM:

Una pared entre dominios magnéticos (DW) es una región de transición de la magnetización entre distintos dominios magnéticos [1]. El estudio de las DWs es interesante tanto desde el punto de vista fundamental como aplicado, dado que la estructura interna de estas DWs determinará su dinámica y en consecuencia afectará a propiedades como la permeabilidad o la coercitividad. Particularmente, la existencia de paredes de Néel abre la posibilidad de manipular los dominios del material mediante corriente que circule por una capa conductora cercana, típicamente un metal pesado como Pt o W [2,3]. Este tipo de excitación es energéticamente más eficiente que la manipulación mediante campos o torques de transferencia de spin, pero no es posible cuando las paredes presentes son de tipo Bloch [2].

Desde el punto de vista aplicado, el control preciso de esta dinámica permite plantear propuestas para nuevas aplicaciones como memorias [4] o sensores [5] entre otras. Durante muchos años, estas propuestas estaban limitadas a materiales ferromagnéticos o ferrimagnéticos sin puntos de compensación [6] o lejos de los puntos de compensación de la magnetización y del momento angular. No obstante, los avances conseguidos recientemente en la detección y manipulación de materiales antiferromagnéticos mediante medidas eléctricas ha ampliado la paleta de materiales a usar en dispositivos espintrónicos [7]. Por otro lado, estos materiales presentan ventajas adicionales como una dinámica intrínseca más rápida que los materiales ferromagnéticos.

La memoria racetrack de dominios magnéticos [4] ha sido una de las propuestas que más atractivo ha generado. Un tratamiento paralelizado de la información contenida en estos trenes de dominios requiere, no obstante, demultiplexar estos dominios. Aunque esta operación resulta viable usando materiales ferromagnéticos, demanda un control preciso de las características de los pulsos de corriente aplicados al sistema [8]. Se espera que el uso de materiales ferrimagnéticos en el punto de compensación del momento angular permita un esquema de excitación más sencillo, rápido y eficiente.

En este contexto, proponemos que se realice un estudio teórico-numérico que caracterice el comportamiento de una estructura en forma de Y de un material ferrimagnético. Se espera obtener las corrientes críticas de inyección en función del tipo de pared, ángulo de apertura de la Y, rama de inyección, tiempo de pulso y anchura de la tira. Para ello, contará con acceso a una GPU con la que realizar las simulaciones micromagnéticas usando el paquete de software MuMax3 [9].

[1] B.D. Cullity and C.D. Graham, Introduction to magnetic materials, John Wiley & Sons (2009).

[2] S. Emori, et al. Current-driven dynamics of chiral ferromagnetic domain walls. Nature Materials 12, 611 (2013).

[3] H. Kontani, et al. Giant orbital Hall effect in transition metals: origin of large spin and anomalous Hall effects Phys. Rev. Lett. 102, 016601 (2009).

[4] S. S. P. Parkin, M. Hayashi, and L. Thomas, Science 320, 190 (2008).

[5] L. Zhang et al. Ultrahigh detection sensitivity exceeding 105 V/W in spin-torque diode, Appl. Phys. Lett., 113, 102401 (2018).

[6] L. Caretta, Fast current-driven domain walls and small skyrmions in a compensated ferrimagnet. Nature Nanotech 13, 1154 (2018).

[7] E. V. Gomonay and V. M. Loktev; Spintronics of antiferromagnetic systems. Low Temp. Phys. 40, 17 (2014).

[8] L. Sánchez-Tejerina, en preparación.

[9] A. Vansteenkiste, et al. The design and verification of Mumax3, AIP Advances, 4, (2014).

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 12

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Estudio experimental de mecanismos termoelectricos en Memristores de Óxido de Hafnio
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Salvador Dueñas Carazo, Héctor García García Departamento de Electricidad y Electrónica GIR de Caracterización de Materiales y Dispositivos Electrónicos
<p>Resumen y objetivos del TFM:</p> <p>En este Trabajo se estudiarán las propiedades de conmutación resistiva de estructuras Metal-Aislante-Semiconductor en las que el aislante es óxido de hafnio que presenta propiedades de conmutación resistiva.</p> <p>El trabajo consistirá en realizar medidas experimentales de los ciclos de conmutación resistiva en un amplio rango de temperaturas: desde temperaturas próximas a la del nitrógeno líquido hasta temperaturas superiores a la ambiente (hasta 350 K). A cada temperatura se realizará un estudio de los mecanismos de conducción en los estados de alta y baja resistencia (HRS y LRS). Para ello se realizarán ajustes de los datos experimentales con los diferentes mecanismos de conducción en aislantes habitualmente propuestos (Schottky, Poole-Frenkel, Fowler-Nordheim, Space-Charge Current Limited, etc) a fin de determinar cuál de estos mecanismos es el que mejor describe el comportamiento de los memristores. Posteriormente se realizarán los ajustes entre teoría y experiencia necesarios para determinar los parámetros físicos relevantes en los mecanismos de conducción (barreras de energía, energías de activación, etc.).</p> <p>Finalmente se obtendrán conclusiones relevantes respecto a la morfología de los filamentos conductores y, en particular, se calculará la evolución de la anchura del gap existente entre los filamentos conductores y el electrodo metálico donde se produce la conmutación para determinar si existe alguna dependencia de esta magnitud con la temperatura.</p> <p>Dada la actualidad de la temática y la novedad del experimento es esperable que los resultados de este trabajo den lugar a publicaciones en revistas científicas y en congresos internacionales especializados.</p>	

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 13

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Nanomateriales para Computación Cuántica: Qubits basados en tecnología de Silicio
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Jorge Serrano Gutiérrez Óscar Martínez Sacristán Departamento de Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía, OPTRONLAB
<p>Resumen y objetivos del TFM:</p> <p>El desarrollo de ordenadores cuánticos actualmente requiere diseñar dispositivos qubits de forma escalable, confiable, y con una reproducibilidad de lectura mucho mayor de la actualmente presente.</p> <p>A pesar de las innovaciones presentadas por Google e IBM, entre otras grandes compañías, los qubits desarrollados a base de superconductores requieren un funcionamiento a bajas temperaturas que limita su escalabilidad y estructuración en sistemas de computación complejos.</p> <p>La tecnología de Si empleada en microelectrónica permite alcanzar esta escalabilidad en la medida en la que seamos capaces de adaptar los procesos de diseño y fabricación a las condiciones necesarias para obtener nanohilos de Silicio con dopaje controlado y puertas metálicas adecuadas, introduciendo el mínimo posible de tensiones en el nanohilo para garantizar el funcionamiento, repetibilidad y fiabilidad de lectura del qubit.</p> <p>En este TFM emplearás técnicas de caracterización espectroscópicas de vanguardia, como micro- y nano-Raman imaging, y de microscopía de fuerzas atómicas para estudiar el dopado y las tensiones de Chips de Si producidos por el Centro Nacional de Microelectrónica en el proceso de diseño de qubits basados en tecnología de silicio.</p> <p>Los objetivos del TFM son:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Descubrir los fundamentos de la tecnología de qubits basados en Silicio • Comprender los desafíos en el desarrollo de esta tecnología • Aplicar con éxito técnicas de caracterización espectroscópica basadas en el efecto Raman en nanoestructuras • Obtener información de las tensiones y el dopado en nanohilos de Si integrados en chips producidos tecnología CMOS 	

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 14

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Caracterización, mediante técnicas de microscopía óptica, de compuestos III-V con N diluido
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Oscar Martínez Sacristán Física de la Materia Condensada, Cristalografía y Mineralogía Materiales semiconductores y nanoestructuras para la optoelectrónica (GdS-Optronlab)
Resumen y objetivos del TFM:	
<p>La incorporación de pequeñas cantidades de N en GaP tiene la ventaja de disminuir el parámetro de red, así como inducir una transición desde gap indirecto a directo (bien descrita por el modelo “anticrossing”). Para una fracción molar de N de $x = 0,021$, el compuesto ternario $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ se ajusta a la red de Si con un bandgap directo de aproximadamente 1,96 eV a temperatura ambiente, lo que hace que este material sea único para la integración de emisores en el rojo pseudomórficos y células solares fotovoltaicas III-V con el Si, material muy generalizado y altamente escalable y rentable.</p> <p>Sin embargo, a pesar del gran potencial del GaPN, los dispositivos comerciales emisores de luz roja siguen basándose en aleaciones de $\text{Al}_x\text{In}_y\text{Ga}_{1-x-y}\text{P}$, y la eficiencia de los compuestos de $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ crecidos sobre Si sigue siendo demasiado baja como para considerar esta combinación de materiales una tecnología competitiva. Esta situación se debe a la dificultad de sintetizar aleaciones $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ con elevada calidad cristalina. En concreto, la calidad del material se degrada al aumentar el contenido de N y el espesor de la capa, como ocurre con las capas epitaxiales crecidas mediante epitaxia en fase vapor de metal-orgánicos (MOVPE) y epitaxia de haces moleculares asistida por plasma (PA-MBE).</p> <p>La epitaxia mediante haces químicos (CBE), una técnica de crecimiento epitaxial de ultra alto vacío, que se caracteriza por el uso de precursores gaseosos en forma de haces moleculares tanto para los elementos del grupo III como para el grupo V, ofrece importantes ventajas sobre los métodos alternativos para la síntesis de compuestos $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$. Principalmente, debido a que el N no se produce a partir de una fuente de plasma de N_2 de radiofrecuencia, por lo que no se produce daño en los cristales asociado al impacto de iones de N, que sí es un problema importante en PA-MBE, y que obliga a realizar tratamientos térmicos rápidos ex situ para mejorar la calidad del material. Sin embargo, la información existente sobre la síntesis de compuestos $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ mediante CBE son muy escasos. Por ello, es necesario explorar exhaustivamente la epitaxia por haces químicos de aleaciones $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ sobre sustratos de Si (001), y así dilucidar el potencial de la técnica CBE para la integración pseudomórfica de dispositivos $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ sobre Si.</p> <p>En este trabajo, y en colaboración con el Dpto. de Física Aplicada de la Univ. Autónoma de Madrid (quien crece las muestras), se pretende hacer una caracterización mediante técnicas de microscopía óptica (micro-Raman/micro-PL y Catodoluminiscencia) de diferentes aleaciones de $\text{GaP}_{1-x}\text{N}_x$ crecidas sobre sustratos GaP/Si(001), compatibles con la tecnología CMOS, para la integración de compuestos III-V sobre Si.</p> <p>El/la estudiante de máster aprenderá a manejar con soltura las técnicas de caracterización propuestas e iniciará un trabajo de investigación en el campo de la optoelectrónica, en una temática de enorme actualidad.</p>	

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 15

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Estudio de la generación de centros de color en diamante por interacción de defectos puntuales mediante simulaciones atómicas
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Iván Santos Tejido Luis A. Marqués Cuesta Departamento de Electricidad y Electrónica Grupo de Modelado Multiescala de Materiales
<p>Resumen y objetivos del TFM:</p> <p>El presente TFM pretende analizar la generación de los denominados “centros de color” en diamante, que tienen un gran potencial en computación cuántica al ser candidatos para fabricar qubits. Estos centros de color están formados por defectos puntuales (vacantes y átomos intersticiales) e impurezas. Para poder optimizar la fabricación controlada de estos centros de color es necesario conocer los mecanismos que dan lugar a su formación, lo que implica determinar correctamente la interacción de los defectos puntuales que los forman.</p> <p>Dependiendo de las destrezas del estudiante, los objetivos de este TFM podrían ir desde la caracterización de la dinámica e interacción de defectos intrínsecos en diamante, hasta la caracterización de la dinámica e interacción de estos defectos con impurezas. Para ello se podrán utilizar potenciales de interacción atómica tradicionales o generados con técnicas de <i>machine learning</i>, y llegado el caso incluso simulaciones basadas en la Mecánica Cuántica y en el denominado Teorema del Funcional de la Densidad (<i>Density Functional Theory</i>, DFT).</p> <p><u>Observaciones</u></p> <ul style="list-style-type: none"> • Las simulaciones se realizarán en servidores con Linux, por lo que es recomendable estar familiarizado con ese sistema operativo. • En este trabajo será necesario realizar pequeños programas para preparar las simulaciones o analizar datos, por lo que es recomendable tener cierta predisposición a la programación. 	

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 16

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Estudio de propiedades estructurales y dinámicas del Fe líquido a altas presiones y temperaturas mediante simulaciones de primeros principios y redes neuronales
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Beatriz G del Rio Física Teórica, Atómica y Óptica

Resumen y objetivos del TFM:

El Fe líquido, en condiciones de altas presiones y temperaturas, se considera como el componente básico del núcleo de algunos planetas, incluyendo la Tierra. El estudio experimental bajo estas condiciones de presión y temperatura es extremadamente difícil, y en algunos casos imposible. Una solución es la simulación atómica del material, en la cual se pueden fijar las condiciones del núcleo terrestre.

El objetivo de este TFM es la realización de un cálculo teórico de varias propiedades estructurales y dinámicas del metal Fe en fase líquida en un rango de presiones y temperaturas cercanas a su línea de fusión. Dicho rango incluirá presiones y temperaturas similares a las existentes en el núcleo líquido de nuestro planeta.

En este estudio se utilizarán dos técnicas de simulación. La primera utilizará una simulación de primeros principios donde el Fe líquido será caracterizado mediante un modelo consistente en unos 100 átomos y cuyas interacciones se describirán resolviendo la ecuación de Schrödinger para los electrones de valencia. De esta forma se generarán varios miles de configuraciones, las cuales servirán posteriormente para evaluar diferentes propiedades estáticas, dinámicas y también algunos coeficientes de transporte (difusión, viscosidad, velocidad del sonido, etc)

Se analizará el orden de corto alcance que existe en el Fe líquido con especial interés en la posible existencia de estructuras tipo icosaédrico. Finalmente, también se calculará la densidad electrónica de estados y la forma de su evolución con el aumento de la presión y temperatura a lo largo de la línea de fusión.

Sin embargo, debido a las restricciones de tiempo y tamaño impuestas por las simulaciones de primeros principios, también se creará un potencial de redes neuronales, basado en los cálculos anteriores, que permitirá el estudio del Fe líquido con miles de átomos y durante tiempos mucho más largos. Este estudio permitirá refinar y mejorar la precisión de las propiedades anteriores, eliminando el efecto de tamaño así como accediendo de forma efectiva al rango hidrodinámico del sistema.

Este TFM permitirá que el alumno aprenda a manejar los códigos de simulación atómica más populares y que, en combinación con ciertos conceptos de Física Estadística, los aplique a la determinación de las propiedades estructurales de metales en fase líquida. Así mismo, el alumno adquirirá experiencia en el uso de redes neuronales para la creación de potenciales atómicos, de gran utilidad e importancia en los últimos años para la simulación de materiales. El trabajo servirá para que el alumno tenga un primer contacto con métodos cuánticos y también con métodos aproximados de simulación en Física Atómica.

MÁSTER EN FÍSICA

PROPUESTA DE TEMA DE TRABAJO FIN DE MÁSTER

TFM N° 17

MENCIÓN:	Física de Materiales
TÍTULO:	Aplicación de la Inteligencia Artificial al almacenamiento de hidrógeno en COFs (Covalent-Organic Frameworks) a temperatura ambiente y presiones moderadas
Tutor (*): (Departamento y grupo de investigación)	Iván Cabria Álvaro Departamento de Física Teórica, Atómica y Óptica Grupo de Propiedades Nanométricas de la Materia
<p>Resumen y objetivos del TFM:</p> <p>El vehículo de hidrógeno es una alternativa a los vehículos basados en combustibles fósiles. Este tipo de vehículo no emite gases contaminantes, ni contribuye al cambio climático. Su principal problema es su baja autonomía. El objetivo es obtener un material sólido nanoporoso que almacene suficiente hidrógeno como para recorrer unos 600 km sin repostar, a temperatura ambiente y presiones moderadas (20-35 MPa).</p> <p>Los algoritmos de Inteligencia Artificial sirven para encontrar relaciones entre la estructura de los materiales sólidos nanoporosos y sus capacidades de almacenamiento de hidrógeno y alcanzar de esa manera el objetivo de un material sólido nanoporoso que almacene suficiente hidrógeno como para recorrer unos 600 km.</p> <p>Este TFG tiene dos tareas principales:</p> <p>Primera tarea. El estudiante creará una base de datos de las porosidades, las densidades, el tamaño de los poros y las capacidades volumétrica y gravimétrica de almacenamiento de hidrógeno a temperatura ambiente y a 25 MPa de COFs (Covalent-Organic Frameworks), un tipo de material sólido nanoporos. Realizará simulaciones de Monte Carlo para obtener dichos datos.</p> <p>Segunda tarea. El estudiante aplicará un código de redes neuronales a la base de datos de los COFs y analizará los resultados en función de los parámetros de la red neuronal. Buscará las relaciones entre la estructura (porosidad, densidad y tamaño de poro) y las capacidades de almacenamiento de hidrógeno de los COFs.</p> <p>Se proporcionará al estudiante el código de redes neuronales y el código de las simulaciones de Monte Carlo.</p>	