



Desarrollo de software para la construcción de estructuras periódicas de van der Waals de 2 o más capas mediante el uso de métodos Geométricos.

El objetivo de esta Tesis es desarrollar un código computacional intuitivo, flexible, robusto y abierto (open source) que haciendo uso de métodos geométricos construya sistemas conmensurables, o Cristales de van der Waals, de varias capas atómicas.

Se comenzará con el acercamiento a conceptos básicos del estado sólido, como elementos de cristalografía, tipos de redes de Bravais, bases atómicas y operaciones de simetría que se pueden aplicar sobre estos sistemas tales como rotación expansión y/o traslación.

Finalmente se desarrollará un software con el que se construirán y estudiarán sistemas 2D laminares (de varias capas) a partir de celdas primitivas, las cuales pueden ser, cuadradas como lo es la fase alfa del GeSe, rectangulares como el fosforeno negro y hexagonales como el grafeno, identificando la celda conmensurable más pequeña y con menor tensión entre las capas. Así mismo, en el caso de sistemas con varias capas, usando el mismo software, se pretende que el sistema generado tenga una quiralidad específica como es el caso de grafeno sobre grafeno.

La bibliografía propuesta es la siguiente:

- George E. Martin. Transformation Geometry, An Introduction to Symmetry. Springer.
- Bijan Davvaz. Groups and Symmetry, Theory and Applications. Springer
- Harald Ibach-Hans Lüth. Solid-State Physics, An Introduction to Principles of Materials Science. Springer
- Giuseppe Grosso-Giuseppe Pastori Parravicini. Solid State Physics, Second Edition. Elsevier
- Sebastien Chazallet. Python 3: Los fundamentos del lenguaje (3ª edición). ENI