**Propuesta de tesis**

Este documento contiene una propuesta de tesis que esta siendo ofrecida a los nuevos estudiantes de doctorado del Programa de Doctorado en Ciencias de la Computación por un profesor UNIR que es miembro del programa. Esperamos que la propuesta de investigación resulte de interés para algunos de los estudiantes que solicitan admisión al programa. Un estudiante de doctorado no tiene por qué atenerse a las propuestas publicadas, sino que tiene libertad para designar el tema de investigación del que tratará su tesis. Sin embargo, si durante el proceso de admisión designa una propuesta de tesis publicada, la Comisión Académica valorará esta petición de cara a la asignación de su director de tesis. Además, las propuestas de tesis se desarrollan dentro de grupos y líneas de investigación para la que disponemos de investigadores especializados, que además pueden tener ayudas económicas asociadas. Le recomendamos contactar con el profesor que publica la ayuda para obtener más información sobre esta propuesta.

**Datos de la propuesta**

|  |
| --- |
| **Título** |
| Modelado de las Propiedades Ópticas No Lineales en Nanocintas de Grafeno Funcionalizadas: Aplicaciones en Fotónica y Computación Cuántica. |
| **Línea de investigación1** |
| Métodos numéricos aplicados a la ingeniería y la inteligencia artificial. |
| **Breve descripción y objetivos** |
| Las nanocintas de grafeno funcionalizadas (GNRs) son materiales de baja dimensionalidad con propiedades electrónicas y ópticas únicas que las hace prometedoras para aplicaciones en fotónica no lineal, telecomunicaciones ópticas y computación cuántica. A pesar del creciente interés en su respuesta óptica no lineal, la influencia de factores como el confinamiento electrónico, la dispersión electrónica, la funcionalización química y la aplicación de un campo eléctrico externo en su eficiencia óptica y estabilidad cuántica sigue sin estar completamente caracterizada.  Este proyecto explorará estos factores a nivel computacional mediante la teoría de perturbaciones y cálculos Time-Dependent DFT (TDDFT), proporcionando una comprensión más profunda de cómo las propiedades electrónicas y cuánticas de las nanocintas pueden optimizarse, estableciendo nuevos criterios para su diseño y aplicación en tecnología cuántica y fotónica avanzada.  El grupo de investigación dispone de una cuenta en el superordenador Finis Terrae III del centro de supercomputación CESGA, y el software de GAUSSIAN y ORCA para realizar los cálculos de esta tesis.  Tian, C.; Miao, W.; Zhao, L.; Wang, J. Graphene nanoribbons: Current status and challenges as quasi-one-dimensional nanomaterials. *Rev. Phys.* **2023**, *10*, 100082. |
| **Profesor que convoca la propuesta y dirección de contacto** |
| Ferrán Acuña Parés  [ferran.acuna@unir.net](mailto:ferran.acuna@unir.net) |
| **Información adicional sobre el profesor/organización que publica** |
| Profesor en la Escuela Superior de Ingeniería y Tecnología (ESIT) en los Grados de Física e Ingeniería Informática, e investigador en el grupo OCR de la UNIR. Doctor en Química Computacional, Máster Interuniversitario en Química Teórica y Computacional.  Experiencia en el estudio de las propiedades espectroscópicas y ópticas de moléculas orgánicas y complejos metálicos, así como en la determinación de sus mecanismos de reacción. Ha participado en varios proyectos competitivos de I+D+i, tanto a nivel nacional como europeo. Autor de 18 artículos, 16 en revistas científicas de alto factor de impacto indexadas en JCR. Ha participado con comunicaciones en diversos congresos científicos nacionales e internacionales. |
| **Potenciales ayudas asociadas a la propuesta** |
| A valorar adecuación al programa: Ayudas para la formación de profesorado universitario (FPU) del Ministerio de Ciencia, Innovación y Universidades.  A valorar adecuación al programa: Becas UNIR para la formación de personal investigador. |

1 Las líneas de investigación a las que están adscritos los miembros del Programa de Doctorado en Ciencias de la Computación están publicadas en la siguiente dirección web https://www.unir.net/ingenieria/doctorado-ingenieria-informatica/