



# Seminario de Estudiantes 2018-A

***Invita a la plática del periodo Primavera 2018***

**Formación de Nanoestructuras de Metales de Transición  
Depositadas sobre Superficies (111) de Estructura Cúbica**

**Presenta**

**M.C. Sandra Julieta Gutiérrez Ojeda\***

Instituto de Física "Ing. Luis Rivera Terrazas" (BUAP)

## RESUMEN

En este trabajo se realizan cálculos de primeros principios de la energía total dentro de la teoría del funcional de la densidad (DFT) periódica incluyendo polarización de espín. Se estudian las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas con polarización de espín de nanoestructuras que se formen en superficies de semiconductores binarios con estructura Zinc-Blenda, (Arsenuro de Galio GaAs y Nitruro de Galio GaN). Se considerarán las superficies (111) para investigar la adsorción e incorporación de metales de transición (Manganeso Mn y Cromo Cr) sobre la superficie. Debido a que los metales de transición pueden presentar propiedades magnéticas, se hizo el análisis para el estado no-magnético, ferromagnético y anti-ferromagnético. Las interacciones entre electrones e iones se trataron dentro de las teorías de pseudopotenciales. Las energías de correlación-intercambio se modelaron dentro de la aproximación de gradiente generalizado, (por sus siglas en inglés GGA Generalized Gradient Approximation). Se optimizaron los parámetros estructurales del semiconductor en el volumen (parámetro de red) en la fase antes mencionada. Finalmente, se calcularon las energías de formación y las propiedades electrónicas para determinar las geometrías más favorables.

**Fecha: 08 de Mayo de 2018**

**Lugar: Auditorio del IFUAP, Edificio IF1**

**Horario: 16 h**

- \*email: [sandrag@ifuap.buap.mx](mailto:sandrag@ifuap.buap.mx)
- Contacto: [seminario\\_estudiantes@ifuap.buap.mx](mailto:seminario_estudiantes@ifuap.buap.mx)
- [www.ifuap.buap.mx/seminario/SeminarioEstudiantil.php](http://www.ifuap.buap.mx/seminario/SeminarioEstudiantil.php)
- <https://www.facebook.com/SE.IFUAP>