
 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL <small>Escuela de Pedagogía</small>	FORMATO
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE
Código: FOR020GIB	Versión: 01
Fecha de Aprobación: 10-10-2012	Página 1 de 4


1. Información General	
Tipo de documento	Trabajo de Grado
Acceso al documento	Universidad Pedagógica Nacional. Biblioteca Central
Título del documento	Estudio por DFT de la multicapa 1x1 CrN/GaN; un motivo para la Enseñanza del Modelamiento de Materiales
Autor(es)	Báez Cruz, Ricardo Eulises
Director	Espitia Rico, Miguel ; Díaz Forero, John
Publicación	Bogotá. Universidad Pedagógica Nacional. 2013, 59p.
Unidad Patrocinante	Universidad Pedagógica Nacional
Palabras Claves	Modelamiento de materiales, Multicapa, DFT, Código Wien2k.

2. Descripción
<p>El presente trabajo pretende aportar una herramienta didáctica que facilite la comprensión, manejo y aplicación de conceptos relacionados con la utilización del paquete Wien2k, el cual utilizado para modelar propiedades físicas de compuestos, tales como, Nitruros de metales de transición, Diboruros, nanotubos, películas delgadas, entre otros; materiales de amplia utilización tecnológica e industrial. Adicionalmente, esta herramienta didáctica será de gran apoyo en la enseñanza de la física del estado sólido, porque introducirá al lector al modelamiento teórico de materiales.</p> <p>Lo anterior, soporta la construcción de una cartilla que guie expedita y técnica-mente el inicio en la modelación de propiedades estructurales y electrónicas de un sólido, en este caso, la multicapa 1x1 CrN/GaN (Nitruro de Cromo Nitruro de Galio); de manera que el producido final resuelva los niveles de dificultad que el referido paquete y la teoría llevan inmersos, ampliando el rango de aplicación de la temática expuesta en el ámbito de la producción de conocimiento, tanto disciplinar como pedagógico.</p> <p>La investigación realizada condensa el estudio teórico por DFT de la multicapa 1x1 CrN/ GaN haciendo uso del programa Wien2k, con lo cual se logró encontrar que la multicapa posee propiedades magnéticas y alta rigidez en las fases cristalinas Wurzita y NaCl. A su vez, este proceso investigativo permitió la construcción de una guía técnica que soporta, paso a paso y de forma detallada las especificaciones del uso del paquete Wien2k en la modelación de propiedades estructurales y electrónicas de compuestos.</p>

 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL <small>Escuela de Pedagogía</small>	FORMATO	
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE	
Código: FOR020GIB	Versión: 01	
Fecha de Aprobación: 10-10-2012	Página 2 de 4	

3. Fuentes

- O. Uzenji Akturk and M. Tomak. Lithium and antimony adsorbed on graphene studied by first-principles calculations. Applied Surface Science 258 (2011) 800– 805
- J. Steckl and R. Birkahn. Appl. Phys. Lett. 73(12):1700-1702, 1998. doi:10.1063/1.122250.
- Hiroto Tachikawa, Tetsuji Iyama, and Kazuhisa Azumi, Density Functional Theory Study of Boron- and Nitrogen-Atom-Doped Graphene Chips, Japanese Journal of Applied Physics 50 (2011) 01BJ03
- T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, and D. Ferrand, Science 287, 1019 2000
- Zaoui, S. Kacimi, B. Bouhafs and A. Roula. "PHYSICA B". 358 (2005) 63-71.
- Z Dridi, B Bouhafs, P Ruterana and H Aourag. J. "Phys.: Condens. Matter 14. (2002) 10237-10249.
- G. Casiano Jimenez, W. López Pérez, C. Ortega López, y J. A. Rodríguez Martínez. .
- Estabilidad Relativa del Compuesto CrN. Revista Colombiana de Física, vol. 41, No. 3, Octubre 2009.
- O. Arbouche, B. Belgoumène, B. Soudini and M. Driz. "First principles study of the relative stability and the electronic properties of GaN. Computational Materials Science 47 (2009) 432-438.
- Norikatsu Koide, Toshiki Hikosaka, Yoshio Honda and Masahito Yamaguchi. "Journal of Crystal Growth. 284 (2005) 341-346.
- S. Saib, N. Bouarissa, P. Rodríguez-Hernández, A. Muñoz. "Structural and dielectric properties of AlN under pressure. Physica B 403 (2008) 4059-4062, 2008 Elsevier B.V.
- J. Birch, T. Joelsson, F. Eriksson, N. Ghafoor, L. Hultman. "Single crystal CrN/ScN super lattice soft X-ray mirrors: Epitaxial growth, structure, and properties. Thin Solid Films 514 (2006) 10-19.
- J. Birch, T. Joelsson, F. Eriksson, N. Ghafoor, L. Hultman. "Single crystal CrN/ScN super lattice soft X-ray mirrors: Epitaxial growth, structure, and properties. Thin Solid Films 514 (2006) 10-19.

 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL <small>Escuela de Pedagogía</small>	FORMATO
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE
Código: FOR020GIB	Versión: 01
Fecha de Aprobación: 10-10-2012	Página 3 de 4

4. Contenidos

En consecuencia, el capítulo dos titulado antecedentes y estado actual expone los antecedentes referentes a los estudios teóricos de los compuestos binarios CrN y GaN independientemente, sus favorables espectros de aplicación en la industria y crecimiento de los mismo. Adicional a ello, se presentan los antecedentes respecto a la elaboración de guías técnicas relacionadas al uso del paquete Wien2k como herramienta de cálculo en las predicciones estructurales y electrónicas de sólidos cristalinos. Por último, se presenta una sección de en donde se destaca la importancia de la simulación en Ciencias Físicas, resaltando los métodos y paquetes que se utilizan en dicha labor.

En el capítulo tres se exponen: el planteamiento del problema, la formulación del problema y la pregunta problema. Además de esto, se presenta el objetivo general y los objetivos específicos. Así, como la justificación.

El capítulo cuatro con título Fundamentos Teóricos presenta la base disciplinar de la Teoría del Funcional de la Densidad, las aproximaciones utilizadas para construir el funcional de intercambio y correlación electrónico, los diversos métodos para expandir las funciones de onda y la relación entre D.F.T y el paquete numérico Wine2k.


Para el capítulo quinto se exponen los resultados obtenidos del estudio teóricos de las propiedades estructurales y electrónicas de la Multicapa 1x1 CrN/GaN. De igual forma, los resultados obtenidos de la prueba diagnóstica de la cartilla se exponen en este capítulo. Por último, en el sexto capítulo titulado conclusiones y prospectivas, se presentan las colusiones extraídas de los resultados de la investigación y el proceso de construcción del mismo.

5. Metodología

La primera de ellas es la investigación exploratoria que permitirá realizar un acercamiento al tema a tratar. En un segundo momento será usada la investigación descriptiva la cual permitirá analizar como es y cómo se manifiesta un fenómeno y sus componentes, de esta forma permitiendo comprobar la asociación existente entre las variables de investigación.

Esta implementación metodológica permite direccionar el trabajo según dos ejes transversales. El primero se titula *Optimización de parámetros* por medio del cual se realiza el estudio teórico de las propiedades estructurales de la Multicapa 1X1 CrN/GaN en las tres estructuras cristalográficas Wurtzita, Zicblenda y NaCl, por medio de las siguientes actividades: Ejecutar proceso de inicialización y manejo del Wien2k, Optimizar parámetros en la fase Wurtzita, optimizar parámetros en la fase NaCl, Determinar cual estructura energéticamente más favorable, calcular entalpía en función de la presión y calcular la energía de formación de la multicapa. Por otro lado, el segundo eje teórico se titula *Propiedades electrónicas* que a través del cumplimiento de este se encontraran las propiedades electrónicas de la Multicapa 1X1 CrN/GaN en las estructuras cristalográficas que presenten mayor estabilidad estructural. El cumplimiento de este eje teórico se realiza por medio de las siguientes actividades: Calcular la densidad de estado DOS y Calcular la estructura de bandas.

Finalmente, se realiza un análisis de los resultados obtenidos en las dos etapas descritas anteriormente.

 UNIVERSIDAD PEDAGÓGICA NACIONAL <small>Escuela de Pedagogía</small>	FORMATO		
	RESUMEN ANALÍTICO EN EDUCACIÓN - RAE		
Código: FOR020GIB	Versión: 01		
Fecha de Aprobación: 10-10-2012	Página 4 de 4		

6. Conclusiones			
<p>Se realizaron cálculos de primeros principios para determinar las propiedades estructurales y electrónicas de las multicapas 1x1 de CrN/GaN. De lo cual se concluye que:</p>			
<ol style="list-style-type: none"> 1. Se encuentra que la fase más favorable de cristalización más favorable para multicapa 1x1 CrN/GaN es la hexagonal tipo wurtzita. 2. Se observa que la multicapa 1x1 CrN/GaN, puede sufrir una transición de fase, de la estructura wurtzita a la estructura NaCl, mediante la aplicación de una presión externa, siendo la presión de transición de $PT = 13,5$ GPa. 3. Se encuentra que los valores de los módulos de volumen son $191,5$ GPa en la fase wurtzita y $264,4$ GPa en la fase NaCl. Estos módulos de volumen son altos, por lo que la multicapa es bastante dura, haciéndola atractivas para posibles aplicaciones a altas temperaturas y altas potencias, como un recubrimiento duro, como contacto metal semiconductor, entre otras. 4. Se encuentra que la multicapa 1x1 CrN/GaN posee un comportamiento metálico, debido principalmente a la contribución de los electrones Cr-d. 5. Se observa que la densidad de estados DOS para la polarización de espín arriba y abajo en multicapa 1x1 CrN/GaN, cerca del nivel de Fermi, no son simétricas, por tanto, la multicapa presenta propiedades magnéticas, con momentos magnéticos por celda de $2; 96 \mu_B$ y $6; 0 \mu_B$ en las fases wurtzita y NaCl respectivamente. Lo que le abre la a la multicapa la posibilidad de aplicaciones en espintrónica. 6. Como perspectiva de este estudio, en un trabajo posterior, se propone estudiar como varía la constante de red, el modulo de volumen, las propiedades electrónicas y magnéticas, al aumentar el número de monocapas de CrN. 			
<p>El desarrollo del estudio teórico referente a las propiedades estructurales y electrónicas de la Multicapa 1X1 CrN/GaN permitió la construcción de una cartilla como guía técnica de uso del paquete numérico Wien2k, el cual se realizo para efectuar los cálculos. La construcción y diagnostico de la cartilla permite concluir que la aceptación de la esta guía, basada en la modelación de la supered 1x1 NCr/NGa, obtuvo elevados puntajes según los criterios de Contenido, Diseño y Uso. Lo que le abre un espacio significativo y destacado como una guía técnica de uso para estudiantes interesados en la modelación de compuestos haciendo uso del paquete Wien2k.</p>			

Elaborado por:	Ricardo Eulises Báez Cruz
Revisado por:	Miguel Espitia Rico ; John Díaz Forero

Fecha de elaboración del Resumen:	8	Noviembre	2013
--	---	-----------	------