

Próximas disertaciones Red COMPUMAT

Jueves 20 de abril (10:30hs)

Parametrización del Potencial de Intercambio TB-mBJ dentro del marco de la Teoría de la Funcional Densidad

Arles V. Gil Rebaza

- (1) Dpto. de Física, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata (FCE-UNLP), Instituto de Física La Plata (IFLP, CCT La Plata, CONICET), cc 67, 1900 La Plata, Argentina
- (2) Grupo de Estudio de Materiales y Dispositivos Electrónicos, Dpto. de Electrotecnia, Facultad de Ingeniería, UNLP

La Teoría de la Funcional Densidad (DFT) es ampliamente usada en el ámbito de la materia condensada debido a su potencialidad para determinar y/o predecir diferentes propiedades de materiales. Estos cálculos han tenido un gran éxito para la predicción y comprensión de diferentes propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de los sólidos. Sin embargo, las aproximaciones usualmente empleadas (LSDA y GGA) son insuficientes en muchos casos y varias deficiencias aparecen. Una de ellas es la subestimación del band-gap de semiconductores. De hecho, uno de los mayores desafíos de la DFT es predecir correctamente el band-gap de sistemas semiconductores, para lo cual han sido propuestas diferentes aproximaciones que van “más allá” de las aproximaciones (semi)locales LDA y GGA, tales como DFT+U, meta-GGA, funcionales híbridas, aproximación GW, etc., pero con el inconveniente que son computacionalmente demandantes. Una alternativa que compensa la precisión de los resultados y la demanda de recursos computacionales, es el uso del Potencial de intercambio de Becke-Johnson (BJ) modificado por Tran-Blaha (TB-mBJ).

En el presente trabajo analizaremos brevemente las diferentes parametrizaciones del potencial TB-mBJ, realizadas a partir de la comparación con datos experimentales del band-gap de una serie diferentes compuestos semiconductores. Luego, presentamos los resultados calculados del band-gap de los compuestos semiconductores $\text{Sn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ en función de x , considerando las diferentes parametrizaciones del potencial de TB-mBJ propuestas.

Los resultados obtenidos difieren aún de los valores experimentales reportados, lo cual nos conlleva a proponer una nueva parametrización del potencial de TB-mBJ que depende básicamente de la cantidad de electrones $3d$ -Ti presente en el sistema de estudio. Los

cálculos ab-initio considerando el potencial TB-mBJ, han sido realizados en el contexto del método FP-LAPW implementado en el código Wien2k. Además, los valores obtenidos del band-gap en función de x , han sido comparados con cálculos del band-gap usando el método de Pseudopotenciales y la funcional híbrida HSE06 implementada en el código Quantum-Espresso y además con diferentes datos experimentales obtenidos de la bibliografía.

Jueves 18 de mayo (10:30hs)

**Caracterización y simulación de celdas solares p-i-n de silicio amorfo
hidrogenado con códigos numéricos.**

Helena Ramírez Jiménez

Instituto de Física (IFIS)-Litoral, Univ. Nacional del Litoral (UNL)-CONICET

En esta charla se presentan los resultados obtenidos del estudio con simulaciones numéricas empleando el código D-AMPS (*New Developments – Analysis of Microelectronic and Photonic Structures*) de diferentes aspectos del transporte eléctrico en estructuras simples p-i-n (o n-i-p) de silicio amorfo hidrogenado (a-Si-H) bajo condiciones de estado estacionario. Los resultados obtenidos encuentran aplicación en el modelado y caracterización de celdas solares de simple y múltiple juntura siendo las últimas parte del grupo denominado de tercera generación.