



SEMINARIO

Estudio mediante simulaciones ab-initio de las propiedades estructurales y magnéticas en heteroestructuras de óxidos

JUAN IGNACIO BELTRÁN

*Departamento de Física de Materiales, Facultad de CC. Físicas,
Universidad Complutense de Madrid, Madrid*

JUEVES 22 DE NOVIEMBRE A LAS 12:00

Departamento de Física de Materiales, Sala de Seminarios, UCM

Las heteroestructuras de óxidos con estructura perovskita (como $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3/\text{BaTiO}_3$ y $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$) exhiben propiedades muy prometedoras para llegar a ser referentes tecnológicos en óxidos electrónicos, espintrónica y otras aplicaciones. Avances en las diferentes técnicas experimentales han logrado la capacidad de crecimiento capa a capa y la caracterización atómica de dichas heteroestructuras de óxidos, pero aún hay limitaciones en el control de diversas direcciones de crecimiento y caracterización del papel jugado por las elusivas vacantes de oxígeno [1]. Adicionalmente en estos sistemas de baja dimensionalidad, como son las intercaras, en ocasiones se reducen las propiedades magnéticas como ocurre debido a la capa muerta en las manganitas [2]. En esta charla discutiré las relaciones entre propiedades estructurales y electrónicas mediante simulaciones de la teoría del funcional de la densidad en intercaras compuestas por manganitas y/o titanatos. Nuestros resultados indican que el control en las vacantes de oxígeno, o en las direcciones de crecimiento, generan modificaciones de simetría en el campo cristalino que dan lugar a un incremento de los momentos magnéticos locales debido a las discontinuidades inherentes a la intercara, o al aumento en las correlaciones electrónicas [3-4].

- [1] N. Pavlenko et al., Phys. Rev. B 86, 064431 (2012)
- [2] R. Peng et al., Appl. Phys. Lett. 104, 081606 (2014)
- [3] J.I. Beltrán et al., Phys. Rev. B 95, 245120 (2017)
- [4] G. Santolino et al., Nat. Nano 12, 655 (2017)

