



SEMINARIO

# Caracterización estructural y electrónica de materiales utilizando la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT)

RUTH MARTÍNEZ CASADO

*Departamento de Física de Materiales, Facultad de Ciencias Físicas,  
Universidad Complutense de Madrid*

**JUEVES 24 DE ENERO A LAS 12:00**

Departamento de Física de Materiales, Sala de Seminarios, UCM

El principal objetivo al estudiar un material es encontrar un nexo común entre las propiedades físicas y químicas a escala atómica y las macroscópicas. Este nexo es fundamental para que el material tenga aplicaciones tecnológicas. Desde el punto de vista teórico, la mayor aportación es encontrar la relación entre la composición, la estructura y las propiedades del compuesto utilizando técnicas computacionales. La teoría del funcional de la densidad es una herramienta muy práctica para estudiar las propiedades de los materiales sin utilizar parámetros empíricos. El programa CRYSTAL [1] tiene la particularidad de emplear orbitales de tipo gaussiano, lo que permite utilizar funcionales híbridos con un coste computacional relativamente bajo. Como mostraré en esta charla, estos funcionales híbridos mejoran la precisión a la hora de calcular el band gap del sistema [2]. En particular, la discusión se centrará en una serie de materiales que he estudiado a lo largo de estos años mediante CRYSTAL, como son el  $\text{TiO}_2$ , el grafeno y el  $\text{CeFe}_{11}\text{Ti}$ . Como muestran estos resultados, la teoría del funcional de la densidad es un método adecuado y, por tanto, de gran interés en el análisis de semiconductores y metales, que permite conjugar de forma eficiente teoría y experimento.

[1] R. Dovesi, R. Orlando, A. Erba, C. M. Zicovich-Wilson, B. Civalleri, S. Casassa, L. Maschio, et al. CRYSTAL14: A program for the ab initio investigation of crystalline solids. *Int. J. Quantum Chem.* **114**, 1287 (2014).

[2] A. Reshak, D. Stys, S. Auluck, and I. Kityk. Density functional calculations of the electronic structure of 3-phenylamino-4-phenyl-1,2,4-triazole-5-thione. *Phys. Chem. Chem. Phys.* **12**, 2975 (2010).

