



ESTADOS MAGNÉTICOS DE LA SUPERFICIE α -Fe₂O₃ (0001): UN ESTUDIO DFT + U

Arnulfo Montoya¹, Oscar Olvera¹, Víctor Dominguez², Julio Gonzalez¹

¹Área de Física Atómica Molecular Aplicada (FAMA), CBI, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Ciudad de México, 02200, México.

²Área de Química Aplicada, CBI, Universidad Autónoma Metropolitana-Azcapotzalco, Av. San Pablo 180, Col. Reynosa Tamaulipas, Ciudad de México, 02200, México.
arnulfo.montoya@gmail.com

Se estudiaron las diferencias, tanto geométricas como electrónicas, que presentan los diferentes estados magnéticos de la superficie α -Fe₂O₃ (0001), utilizando el método DFT+U, que considera la repulsión adicional de los electrones 3d del Fe, y la funcional de intercambio-correlación Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) implementada en el programa VASP. Los electrones desapareados del Fe modifican el momento magnético de la superficie, por lo tanto, se determinó la variación de la energía total para los diferentes estados magnéticos de la superficie para identificar el más estable. Se caracterizó la superficie del soporte α -Fe₂O₃ (0001) a través de la densidad de estados total, análisis de población electrónica y variación del momento magnético. La superficie, con los oxígenos expuestos, presenta un estado ferromagnético, a diferencia de la α -Fe₂O₃ en volumen que muestra un estado antiferromagnético.

Referencias: α -Fe₂O₃ (0001), DFT+U, PBE, electrones desapareados.