



Efecto de las vacancias en el MnO sobre las propiedades estructurales y electrónicas.

Marcos Rivera Almazo, Alejandra M. Navarrete López, y Rubicelia Vargas
Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Departamento de Química; México
marcoxido@gmail.com

El óxido de manganeso (II), MnO, tiene la posibilidad de ser usado en diversas aplicaciones, por ejemplo en celdas solares o en catalizadores, por lo que su estudio con métodos teóricos resulta relevante. Este tipo de óxidos presentan un reto, debido a la alta correlación electrónica entre sus electrones d ,¹ por lo que se han usado diversas aproximaciones para su estudio. En un trabajo previo mostramos el efecto de incluir el intercambio exacto en el funcional de intercambio y correlación; la conclusión principal de ese trabajo fue que el funcional PBE0 era adecuado para el estudio de las propiedades electrónicas y magnéticas del MnO².

El reto abordado en este trabajo es importante ya que ahora se presentan los efectos de las vacancias en el MnO sobre la estructura geométrica, densidad de estados (DOS) y el band gap. Se discuten también las proyecciones de las contribuciones orbitales a la DOS cuando se tienen o no vacancias. Para esto se hicieron cálculos periódicos, *all electron*, con la Teoría de los Funcionales de la Densidad del sistema cristalino del óxido de manganeso (II). Los conjuntos de base empleados se basan en funciones localizadas tipo gaussiana, que fueron optimizadas para dicho sistema³. El funcional de intercambio y correlación usado fue PBE0, debido a que ningún funcional de intercambio y correlación de tipo LDA o GGA describe correctamente este sistema.

¹D. Pozun y G. Henkelman, J. Chem. Phys. 134, 224706-9 (2011)

²Rivera M., Navarrete-López A. M., Vargas R., Garza J. (2015, noviembre). *Estudio Teórico del MnO: efecto del intercambio exacto*. Poster presentado en la XIV Reunión Mexicana de Físicoquímica, Jalisco, México.

³M. D. Towler, N. L. Allan, N. M. Harrison, V. R. Saunders, W. C. Mackrodt y E. Aprà, Phys. Rev. B, 50, 5041-56 (1994)