

Universidad Autonoma de Nuevo León

FACULTAD DE CIENCIAS FÍSICO MATEMÁTICAS

REPORTE 1

SILICIO, SILICENO Y SILICANO

Autor:

Jesús Eduardo Loera Casas 1898887
18 de marzo de 2021

Índice

| | |
|--|---|
| 1. Actividad | 1 |
| 2. Simulación estructural y electrónica del silicio. | 2 |
| 3. Simulación estructural y electrónica del siliceno. | 2 |
| 4. Datos estructurales del silicio, siliceno y silicano. | 2 |
| Referencias | 2 |

Resumen

En este documento se presenta la actividad 1 del proyecto de investigación en Nanociencia, usando la Teoría Funcional de la Densidad (DFT). Por este medio se reportan los resultados de las simulaciones de una serie de cálculos realizados con el silicio y el siliceno con el fin de describir las características electrónicas de sus celdas unitarias; además se reportan datos recabados en la literatura de dichos materiales además del silicano.

1. Actividad

- Simulación estructural y electrónica del silicio.

Objetivos:

- Optimización de ecutwfc
- Optimización de ecut
- Optimización de puntos k
- Optimización de parámetro de red
- Simulación estructural y electrónica del Siliceno.

Objetivos:

- Optimización de puntos k
- Optimización de parámetro de red
- Hacer una búsqueda en la literatura (artículos científicos) de los parámetros estructurales (parámetro de red, longitud de enlace, ángulos) y propiedades electrónicas (estructura de bandas electrónicas, densidad de estados electrónicos) del silicio, siliceno y silicano.

2. Simulación estructural y electrónica del silicio.
3. Simulación estructural y electrónica del siliceno.
4. Datos estructurales del silicio, siliceno y silicano.

Referencias

- [1] Albert Einstein. Zur Elektrodynamik bewegter Körper. (German) [On the electrodynamics of moving bodies]. *Annalen der Physik*, 322(10):891–921, 1905.
- [2] Michel Goossens, Frank Mittelbach, and Alexander Samarin. *The L^AT_EX Companion*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1993.
- [3] Donald Knuth. Knuth: Computers and typesetting.