

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 electrónico del silicio. | 1 |
| 3. Simulación estructural y electrónico del siliceno. | 1 |

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 electrónico del silicio.

/vspace0.5cm

Objetivos:

- Optimización de ecutwfc
- Optimización de ecut
- Optimización de puntos k
- Optimización de parámetro de red
- Simulación estructural y electrónico del siliceno.

/vspace0.5cm

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 electrónico del silicio.

3. Simulación estructural y electrónico del siliceno.