



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

CENTRO DE NANOCIENCIAS Y NANOTECNOLOGÍA

Inducción de características Half-metal y  
anisotropía magnética perpendicular por efectos  
de bordes en nanocintas de  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$

T E S I S

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

LICENCIADA EN NANOTECNOLOGÍA

PRESENTA:

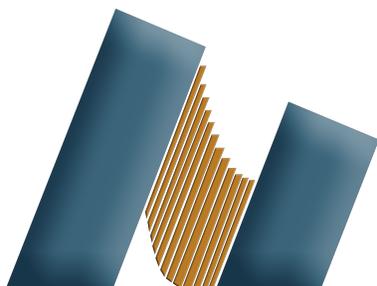
VALERIA RÍOS VARGAS

TUTORES:

DR. RODRIGO PONCE PÉREZ

DRA. MARÍA GUADALUPE MORENO ARMENTA

Ensenada, Baja California, 2022



Centro de Nanociencias y Nanotecnología - UNAM



Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

Hago constar que el trabajo que presento es de mi autoría y que todas las ideas, citas textuales, datos, ilustraciones, gráficas, etc. sacados de cualquier obra o debidas al trabajo de terceros, han sido debidamente identificados y citados en el cuerpo del texto y en la bibliografía y acepto que en caso de no respetar lo anterior puedo ser sujeto de sanciones universitarias.

Afirmo que el material presentado no se encuentra protegido por derechos de autor y me hago responsable de cualquier reclamo relacionado con la violación de derechos de autor.

---

Valeria Ríos Vargas

*Para mis padres Mónica y Alejandro*

# Agradecimientos

Quisiera agradecer a DGAPA-UNAM por su apoyo financiero a través de los proyectos PAPIIT número IN110820 y IA100822. Los cálculos fueron realizados en el centro de supercomputo DGCTIC-UNAM mediante los proyectos LANCAD-UNAM-DGTIC-150 y LANCAD-UNAM-DGTIC-368. Agradezco la experiencia técnica y el apoyo brindado por el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, miembro de CONACYT de la red de laboratorios nacionales, así como al centro de supercomputo THUBAT-KAAL IPICYT por sus recursos computacionales. También agradezco a Eduardo Murillo y Aldo Rodríguez-Guerrero por su apoyo técnico y sus útiles comentarios enfocados a mejorar este trabajo.

Agradezco a la Universidad Nacional Autónoma de México por la oportunidad que me brindó para recibir una educación de calidad, proporcionándome una diversidad de herramientas que me permitieron ampliar mis oportunidades académicas nacional e internacionalmente.

Quiero agradecer a las personas que me acompañaron y guiaron durante la elaboración del presente trabajo de tesis. Principalmente a mis asesores de tesis el Dr. Rodrigo Ponce Pérez y la Dra. María Guadalupe Moreno Armenta, por la generosidad de compartir sus conocimientos conmigo, su mentoría me permitió obtener el entendimiento necesario para concluir esta etapa. También quisiera dar un especial agradecimiento al Dr. Jonathan Guerrero Sánchez por su apoyo durante la investigación realizada en este proyecto, su ayuda y motivación ha sido fundamental en este proceso. La paciencia, entusiasmo y compromiso fue característico de esta trayectoria gracias a ustedes.

A lo largo de estos años en la licenciatura tuve la fortuna de ser alumna de excelentes profesores que compartieron sus conocimientos para lograr lo que he aprendido, por lo anterior considero pertinente agradecer a: Carlos Ochoa, Ana Rodríguez, Catalina López Bastidas, Gabriela Guzmán Navarro, Francisco Mireles, Noé Fernández, David Tijerina, Laura Viana, Eduardo Murillo y Óscar Raymond Herrera. También quiero agradecer a mis amigos y compañeros del Laboratorio Virtual de Materiales : Axel Gaona, Daniel Maldonado, Etienne Palos y Fernando Gonzáles. Durante la carrera tuve la fortuna de conocer a personas diversas con historias y mentes maravillosas, ricas en ideas e intelecto; conocerlas me brindó un panorama de la vida académica y personal muy amplio, por esto quiero agradecerles a:

Leticia y Jessica por las risas, las charlas interminables de ciencia y temas selectos de la vida, por la compañía y sobretodo por su amistad. También quiero agradecer a Diana y América, mis compañeras del eje de nanoestructuras, por su motivación y lucha de seguir adelante en cumplir sus metas, ese entusiasmo ha sido buena influencia en mi persona.

Agradezco también a Emmanuel Rojas por ser un buen amigo con quien se puede platicar de ciencia. Me gustaría agradecer a mis compañeras y compañeros de generación: Enrique, Alejandra, Balam, Josh, Diego, Tonalmi, Rommel, Deyanira, Perla, Jaime y Patsy. Asimismo, quisiera agradecer a Diana Sandoval, Mike y Sebastián (Chicho) por su guía y asesoramiento.

Agradezco también al matemático y poeta Óscar Andrés Ramírez Ramírez por hacer de mis primeros semestres una experiencia increíble. Agradezco las grandes enseñanzas, las pláticas profundas, las emociones y por ser el receptor de ideas y poemas provenientes de una amiga.

Quiero agradecer a mi familia, quienes han sido los pilares de mi vida; quisiera empezar agradeciendo a Mónica Vargas, mi madre, por ser la voz detrás de cada logro, la fundadora de la mayoría de mis principios y el apoyo incondicional que siempre ha representado. De igual manera, agradezco a Alejandro Ríos, mi padre, quien me ha apoyado y brindado la libertad de seguir mis sueños y llevarlos acabo. Agradezco también a mis tías: Maricela, Angélica, Ivonne, Olivia y Montserrat por su amor, comprensión y porque son fuente de inspiración para superarme todos los días en cada aspecto de la vida. Agradezco a mis abuelitas Francisca Serrano e Isaura Liñan por su amor incondicional y su hermosa, sublime y tierna compañía. A mis hermanas: Alejandra, Yessica y a la memoria de Zianya les agradezco sus consejos y la genuina complicidad que existió y existe entre nosotras para planear, crear e imaginar. A Jorge Ríos Cabrera y, finalmente, agradezco a Juan Pablo Arredondo Mirando por su apoyo, cariño y acompañamiento durante la elaboración de este trabajo.

# Índice general

<b>Agradecimientos</b>	<b>III</b>
<b>1 Introducción</b>	<b>1</b>
§1.1 Magnetismo . . . . .	2
§1.1.1 Polarización de espín . . . . .	4
§1.2 Materiales espintrónicos . . . . .	4
§1.3 Anisotropía Magnética Perpendicular . . . . .	6
§1.4 Aplicaciones . . . . .	6
§1.4.1 Unión de Tunel Magnética . . . . .	7
<b>2</b>	<b>9</b>
§2.1 Antecedentes . . . . .	9
§2.1.1 Heteroestructuras Van der Waals . . . . .	9
§2.1.2 $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ en bulto . . . . .	10
§2.1.3 $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bidimensional . . . . .	11
§2.2 Justificación . . . . .	11
§2.3 Hipótesis . . . . .	12
§2.4 Objetivos . . . . .	12
§2.4.1 Objetivo General . . . . .	12
§2.4.2 Objetivos Particulares . . . . .	12
<b>3</b>	<b>13</b>
§3.1 Marco Teórico . . . . .	13
§3.1.1 Ecuación de Schrödinger y el problema de muchos cuerpos . . . . .	13
§3.1.2 Teoría del funcional de la densidad . . . . .	15

§3.1.3	Densidad electrónica . . . . .	15
§3.1.4	Teoremas de Hohenberg-Kohn . . . . .	17
§3.1.5	Ecuaciones Kohn-Sham . . . . .	18
§3.1.6	Aproximaciones para el funcional de intercambio y correlación . . . . .	19
§3.1.7	Ciclo Autoconsistente . . . . .	20
§3.1.8	Interacciones Van der Waals . . . . .	22
§3.1.9	Cálculos de espín órbita . . . . .	23
§3.1.10	Corrección de Hubbard . . . . .	24
§3.2	Metodología . . . . .	25
§3.2.1	Detalles computacionales . . . . .	25
§3.2.2	Determinación de las Nanocintas . . . . .	26
<b>4</b>	<b>Resultados y Discusión</b>	<b>27</b>
§4.1	Propiedades estructurales de CGT en bulto y monocapa . . . . .	27
§4.2	Nanocintas de CGT . . . . .	28
§4.2.1	Estabilidad termodinámica . . . . .	28
§4.2.2	Propiedades estructurales . . . . .	32
§4.2.3	Propiedades electrónicas . . . . .	34
§4.2.4	Propiedades Magnéticas . . . . .	36
<b>5</b>	<b>Conclusiones</b>	<b>39</b>
§5.1	Productos obtenidos . . . . .	40

# Índice de figuras

1.1	Momentos angulares del electrón a) momento angular orbital y b) momento angular de espín . . . . .	2
1.2	Esquema de la densidad de estados de a) metales ferromagnéticos, b) semiconductores magnéticos y c) materiales Half-metal. . . . .	5
1.3	Esquema de la anisotropía magnética dentro del plano a) con ambas capas FM paralelas y b) capas FM antiparalelas. Anisotropía magnética perpendicular fuera de plano c) paralela y d) antiparalela. . . . .	7
1.4	Estructura de un dispositivo de unión de túnel magnética. a) Capas ferromagnéticas con magnetización paralela, b) con magnetización antiparalela. c) y d) esquema de la Densidad de estados en ambos arreglos. . . . .	8
2.1	a) Esquematación de una heteroestructura $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ en una red $1\times 3\times 1$ , b) monocapa que conforma la heteroestructura VdW. . . . .	10
3.1	Gráfica de la densidad electrónica de la molécula de agua a) valores de $\rho(\vec{r})$ proyectados en un plano que contienen los núcleos, b) forma tridimensional de la molécula envuelta por densidad electrónica constante (0.001 a.u.). . .	16
3.2	Esquema del ciclo autoconsistente empleado para cálculos DFT. . . . .	21
4.1	Estructura cristalina mostrada del material CGT en su forma en a) bulto y en b) monocapa. . . . .	27

4.2 Nanocintas CGT con diferentes terminaciones de borde. (a) TG/TG: bordes de TeGe en ambos lados de la nanocinta, (b) TC/TC: bordes de TeCr en ambos lados de la nanocinta, (c) TC/TG: borde de TeCr en la región izquierda y TeGe en la derecha región, (d) TG/TC: TeGe borde en el lado izquierdo, TeCr en el lado derecho de la nanocinta, (e) TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ : TeGe bordes, Te vacantes en ambos bordes, (f) TG-  $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ : TeGe en el borde izquierdo y TeCr en el borde derecho, Te vacancias en ambos bordes, y (g) TG- $V_{Ge}$ /TC- $V_{Cr}$ : TeGe borde y Ge vacantes en la región izquierda, y TeCr borde con Cr vacantes en la región derecha. . . . . 29

4.3 Vacancias estudiadas en nanocintas CGT. Modelo TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ : con vacantes marcadas como átomos rojos (a), antes de la relajación (b) y después de la relajación (c). La nanocinta TG-  $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  destacó las vacantes como átomos rojos (d), antes (e) y después (f) de la relajación atómica. (g), (h) e (i) muestran la nanocinta TG- $V_{Ge}$ /TC- $V_{Cr}$  con vacantes marcadas como átomos amarillos y verdes, antes y después de la relajación, respectivamente. 30

4.4 Planos de la energías de formación de nanocintas de CGT. . . . . 32

4.5 Estructura atómica de las nanocintas estables: a) bordes TC/TC y b) bordes TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  antes de la relajación. La región izquierda (RI) y la región derecha (RD) están resaltadas en azul y verde como las dos primeras capas atómicas del borde. c) Bordes TC/TC y d) Bordes TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  después de la relajación que muestran los cambios estructurales en las dos primeras capas atómicas y los nuevos enlaces formados, e) El cambio en las longitudes de enlace en la nanocinta TC/TC con respecto a la monocapa, y f) El cambio en las longitudes de enlace en la nanocinta TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  en función de las distancias de la monocapa. Las líneas rojas, amarillas y negras que se muestran en los bordes corresponden a los nuevos enlaces Te-Te, Cr-Ge y Cr-Cr, respectivamente, que aparecen debido a la formación de las nanocintas. 33

4.6 Densidad de estados total de nanocintas (a) TC/TC y (d) TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ . Estructura de bandas de orbital proyectado de las nanocintas CGT: (b) y (c) muestran los canales de espín mayoritario y minoritario de la nanocinta TC/TC, respectivamente. (e) y (f) representan las contribuciones de espín mayoritarias y minoritarias de la nanocinta TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ . La energía de Fermi se establece en cero. El tamaño de los círculos representa cada contribución orbital. . . . . 35

# Capítulo 1

## Introducción

El rápido avance de la miniaturización de dispositivos electrónicos ha causado que ingenieros y físicos se enfrenten a la presencia de la mecánica cuántica, en donde las propiedades de los electrones son dominadas por su comportamiento ondulatorio. En la actualidad, los dispositivos semiconductores se basan en el movimiento de carga eléctrica para procesar y calcular información; sin embargo, en el desarrollo de estos dispositivos se ha hecho un gran esfuerzo para evitar las propiedades cuánticas inminentes en la materia confinada. Por otro lado, el almacenamiento de información en discos duros magnéticos es debida a una de las propiedades cuánticas intrínseca de los electrones llamada espín.

El espín es el momento angular magnético del electrón y está fuertemente relacionado con el magnetismo, por lo que también es de gran importancia para el desarrollo de nuevas tecnologías. Los dispositivos que basan su funcionamiento en ambas propiedades, el espín y la carga del electrón, dan surgimiento a una nueva rama de la tecnología llamada espintrónica. La industria del almacenamiento de información ha proporcionado los primeros éxitos en la tecnología espintrónica. Un ejemplo de esto es el equipamiento de las computadoras actuales con discos duros de alta capacidad que almacenan una cantidad sin precedentes de datos en cada milímetro cuadrado. Las unidades se basan en un efecto espintrónico, magnetorresistencia gigante (GMR), para leer datos densos.[1]

## 1.1. Magnetismo

La espintrónica está fuertemente relacionada con la magnetización ya que el espín es el momento magnético intrínseco de los electrones. Esta propiedad es un fenómeno físico por el cual los materiales ejercen una fuerza atractiva o repulsiva que genera influencia sobre otros materiales, la cual puede ser manipulada por campos magnéticos. Las propiedades magnéticas macroscópicas de los materiales son consecuencia del momento magnético asociado a electrones individuales. El momento magnético de los electrones se origina de dos fuentes: el momento magnético orbital y el espín de los electrones.

El momento magnético orbital se relaciona con el movimiento orbital de los electrones alrededor del núcleo; debido a que es una carga en movimiento, un electrón puede considerarse como una pequeña corriente que genera un campo magnético, el cual tiene un momento magnético a lo largo del eje de rotación, como se muestra en la Figura 1.1a [3]

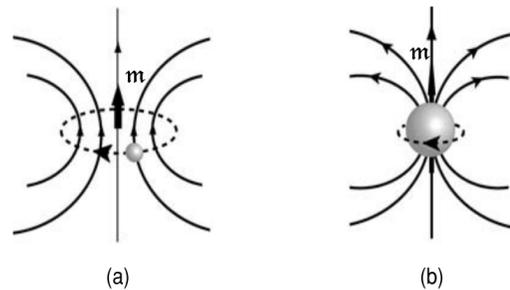


Figura 1.1: Momentos angulares del electrón a) momento angular orbital y b) momento angular de espín

Por otro lado, se puede pensar que cada electrón es una esfera que gira alrededor de su eje de rotación por lo que genera un momento magnético, como se muestra en la Figura 1.1b. Esta propiedad es intrínseca de los electrones y puede tener dos direcciones: espín arriba ( $\uparrow$ ) y espín abajo ( $\downarrow$ ). De esta manera cada electrón se puede considerar como un pequeño imán que tiene momento magnético orbital y de espín permanentemente.

Los momentos orbitales de los electrones en cada átomo se pueden cancelar entre sí; esto también es válido para los momentos de espín. Por ejemplo, el momento de espín de un electrón con espín arriba se cancela con el de un electrón con espín abajo. Entonces, el

momento magnético neto para un átomo es simplemente la suma de los momentos magnéticos de cada uno de los electrones constituyentes, incluidas las contribuciones orbitales y de espín. Para un átomo que tiene capas o subcapas de electrones completamente llenas hay una cancelación total de los momentos orbitales y de espín. Por tanto, los materiales compuestos por átomos que tienen capas de electrones completamente llenas no son capaces de magnetizarse permanentemente, mientras que los que se llenan parcialmente presentan una magnetización neta. [6]

A partir de la magnetización se pueden clasificar cinco tipos de materiales: diamagnéticos, paramagnéticos, ferromagnéticos, antiferromagnéticos y ferrimagnéticos. Los materiales diamagnéticos presentan una magnetización débil, no permanente y persistente sólo si un campo magnético externo es aplicado al material, de lo contrario, el material no presenta magnetización. Sin embargo, en algunos materiales sólidos paramagnéticos cada átomo posee un momento dipolar permanente debida a la cancelación incompleta del espín del electrón. En ausencia de un campo magnético externo, las orientaciones de estos momentos magnéticos atómicos son aleatorias, de modo que una pieza de material no posee magnetización macroscópica neta. Estos dipolos atómicos pueden rotar libremente y se produce paramagnetismo cuando se alinean preferentemente, por rotación, con un campo externo. Por otro lado, los materiales ferromagnéticos poseen un momento magnético permanente en ausencia de un campo externo, y manifiestan una magnetización grande y permanente. Los momentos magnéticos permanentes en materiales ferromagnéticos resultan de momentos magnéticos atómicos debido a espines de electrones no cancelados como consecuencia de la estructura electrónica. También hay una contribución del momento magnético orbital que es pequeña en comparación con el momento de espín. En los materiales antiferromagnéticos ocurre un acoplamiento de momentos magnéticos entre átomos o iones adyacentes. Este acoplamiento da como resultado una alineación antiparalela. Finalmente, el ferrimagnetismo se presenta en algunas cerámicas; las características magnéticas macroscópicas del ferromagnetismo es similar al ferrimagnetismo, la distinción radica en la fuente del momento magnético neto.

Lo que diferencia a los cinco tipos de materiales es el estado de los momentos magnéticos de cada átomo dentro del material antes, durante y después de aplicarle un campo magnético

[25].

### 1.1.1. Polarización de espín

Normalmente, un material no magnético, como silicio (Si), tiene degeneración de espín en sus estados de energía, es decir, que las energías son independientes del espín y la ocupación de ( $\uparrow$ ) y ( $\downarrow$ ) son iguales, por lo que la polarización neta de espín es cero. Por otro lado, en los metales ferromagnéticos (FM) esta degeneración se rompe, por lo que tienen mayor número de estados ocupados de un canal de espín (canal mayoritario) que del otro (canal minoritario), de esta manera la polarización neta de espín es distinta de cero. La polarización de espín se define de la siguiente manera:

$$P_N = \frac{N_{\uparrow} - N_{\downarrow}}{N_{\uparrow} + N_{\downarrow}}$$

donde  $N_{\uparrow}$  y  $N_{\downarrow}$  son el número de electrones con espín  $\uparrow$  y espín  $\downarrow$  en el nivel de Fermi ( $E_F$ ). Bajo esta definición,  $P_N$  mide el desequilibrio de espín de electrones móviles. De modo alternativo se puede definir como la fracción neta de la polarización de espín cerca de  $E_F$ , en este caso se denota como  $P$  como:

$$P = \frac{d_{\uparrow} - d_{\downarrow}}{d_{\uparrow} + d_{\downarrow}}$$

donde  $d_{\uparrow}$  y  $d_{\downarrow}$  son las densidades de estado (DOS) de los canales de espín  $\uparrow$  y espín  $\downarrow$  en  $E_F$ , por lo que  $P$  se puede determinar directamente de la DOS [58].

## 1.2. Materiales espintrónicos

En la espintrónica la información se marca como espín  $\uparrow$  y  $\downarrow$ , en donde los electrones portadores de espín son transportados a lo largo de un camino hasta llegar al punto donde se lee la información. Para poder desarrollar dispositivos espintrónicos capaces de generar corrientes de espín polarizada que mantengan la orientación del espín durante varios nanosegundos se emplean materiales ferromagnéticos. Estos materiales presentan una

magnetización espontánea debida al ordenamiento alineado de los momentos magnéticos en una red atómica. El ordenamiento en los momentos magnéticos ocurre por debajo de la temperatura de Curie ( $T_C$ ). De acuerdo a sus propiedades electrónicas los materiales FM se pueden clasificar en: metales, semiconductores y half-metals (HM, en acuerdo con sus siglas en inglés), estos últimos se caracterizan por generar corriente de espín polarizado alrededor del nivel de Fermi, por lo tanto  $P \neq 0$ .

Los metales ferromagnéticos se caracterizan por tener una densidad de estados distinta para cada dirección del espín, asimismo, alrededor del nivel de Fermi ambos canales presentan un comportamiento metálico, como se muestra en la Figura 1.2a. Por otro lado, los semiconductores magnéticos también presentan una polarización de espín, sin embargo, como es característico en los materiales semiconductores, existe un rango de energías prohibidas ( $E_g$ ) en ambos canales de espín (ver Figura 1.2b). En estos materiales la brecha prohibida de energías puede tener distintos valores por lo que al pasar una corriente a través de un material semiconductor magnético habrá estados que podrán ser ocupados por electrones con espín  $\uparrow$  ó  $\downarrow$ . De esta manera se generaría una corriente de espín polarizada, sin embargo también podría no generarse.

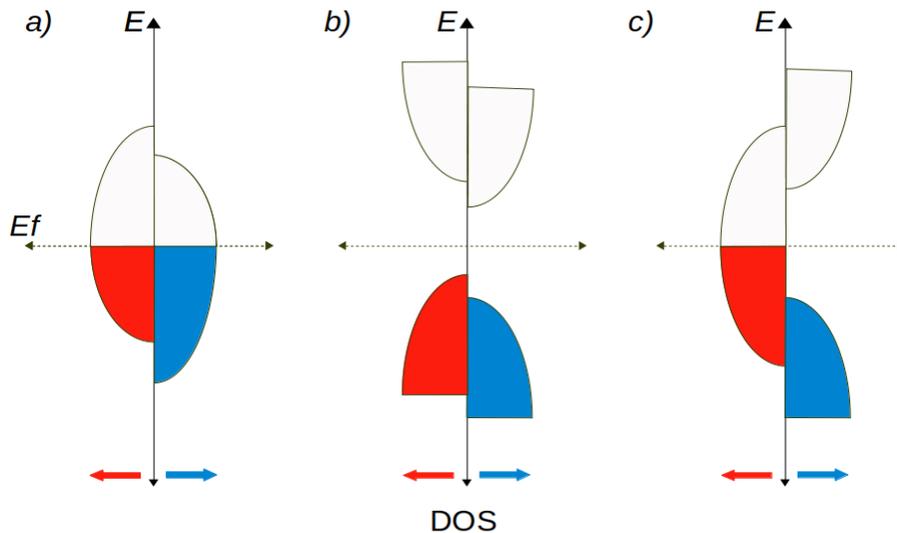


Figura 1.2: Esquema de la densidad de estados de a) metales ferromagnéticos, b) semiconductores magnéticos y c) materiales Half-metal.

Finalmente, los materiales Half-metal se caracterizan debido a que el canal mayoritario se comporta como un metal, mientras que el canal minoritario se comporta como un semi-

conductor o un aislante, como se muestra en la Figura 1.2c. En 1983 de Groot y su grupo de investigación predijeron el comportamiento HM presente en aleaciones Half-Heusler, NiMnSb [20]. En este compuesto los estados del espín  $\uparrow$  exhibían propiedades metálicas, mientras que los estados del espín  $\downarrow$  eran aislantes o semiconductores. La importancia de los materiales HM en el desarrollo de dispositivos espintrónicos es que permite obtener corrientes de espín polarizado con mejor eficiencia.

### 1.3. Anisotropía Magnética Perpendicular

En el almacenamiento magnético de información los datos digitales binarios son almacenados en las direcciones de magnetización de pequeñas regiones en una película delgada magnética. Estas regiones pueden ser leídas o reescritas por un cabezal de grabación que se encuentra a unos nanómetros por encima de la superficie del disco. Inicialmente, el almacenamiento magnético empleaba la grabación longitudinal, en donde los bits se encuentran en el plano de la película delgada (ver Figura 1.3 a y b). Por otro lado, la grabación perpendicular se da en materiales con anisotropía magnética perpendicular (PMA, por sus siglas en inglés), en donde los bits magnéticos son perpendiculares al plano del material, como se muestra en la Figura 1.3 c y d. Con el uso de materiales con PMA el grabado magnético perpendicular (PMR, de acuerdo a sus siglas en inglés) puede aumentar su densidad de almacenamiento en más de un orden de magnitud en comparación al grabado longitudinal [54].

### 1.4. Aplicaciones

El grabado magnético perpendicular se inventó en 1900 por el científico Danes Valdemar Poulsen [41]. En 2002 se implementó en discos duros por primera vez y fue en 2006 que apareció el primer disco perpendicular en el mercado [27]. Desde entonces, materiales con PMA han sido extensamente investigados no sólo por su enorme potencial para almacenar datos y procesarlos a una velocidad miles de veces más rápida, sino también por sus

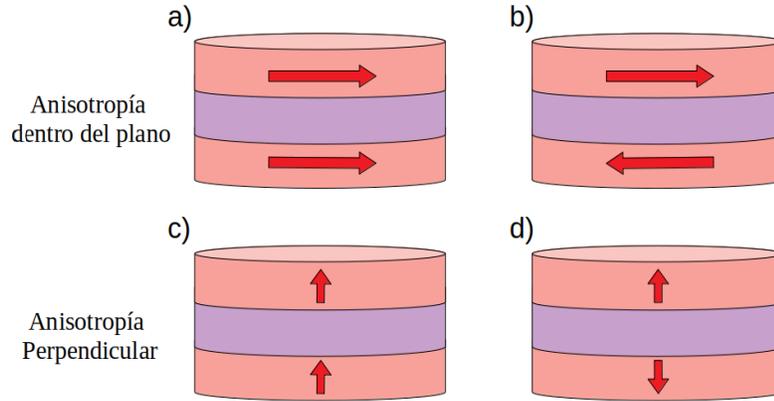


Figura 1.3: Esquema de la anisotropía magnética dentro del plano a) con ambas capas FM paralelas y b) capas FM antiparalelas. Anisotropía magnética perpendicular fuera de plano c) paralela y d) antiparalela.

aplicaciones en grabado magnetoóptico y en dispositivos espintrónicos avanzados como sensores magnetorresistivos y memorias magnetorresistivas de acceso aleatorio (MRAM, en acuerdo con sus siglas en inglés).

Los materiales con PMA son unos de los mejores candidatos para el almacenamiento magnético ya que aumentan la densidad de bits dentro de un material. Asimismo, los materiales HM permiten la obtención de corrientes polarizadas de espín, las cuales se pueden aplicar en dispositivos de memoria.

### 1.4.1. Unión de Tunel Magnética

Las memorias magnetorresistivas de acceso aleatorio usan el efecto de torque de transferencia de espín (STT, en acuerdo con sus siglas en inglés) para almacenar información. El efecto STT se predijo teóricamente por Sloczewski *et al* en 1996 [49] y se observó experimentalmente en uniones de túnel magnéticas (MTJ, en acuerdo con sus siglas en inglés) con la estructura  $\text{CoFe}/\text{Al}_2\text{O}_3/\text{CoFe}$  en 2004 [57]. Las uniones de túnel magnéticas están compuestas por dos capas ferromagnéticas separadas por una barrera delgada de un material aislante no magnético, la primera capa tiene un momento magnético fijo, mientras que la segunda tiene un momento magnético fácilmente reversible.

La primera capa ferromagnética polariza los espines de los electrones portadores de corriente que cruzan la barrera del material aislante no magnético hacia la segunda capa

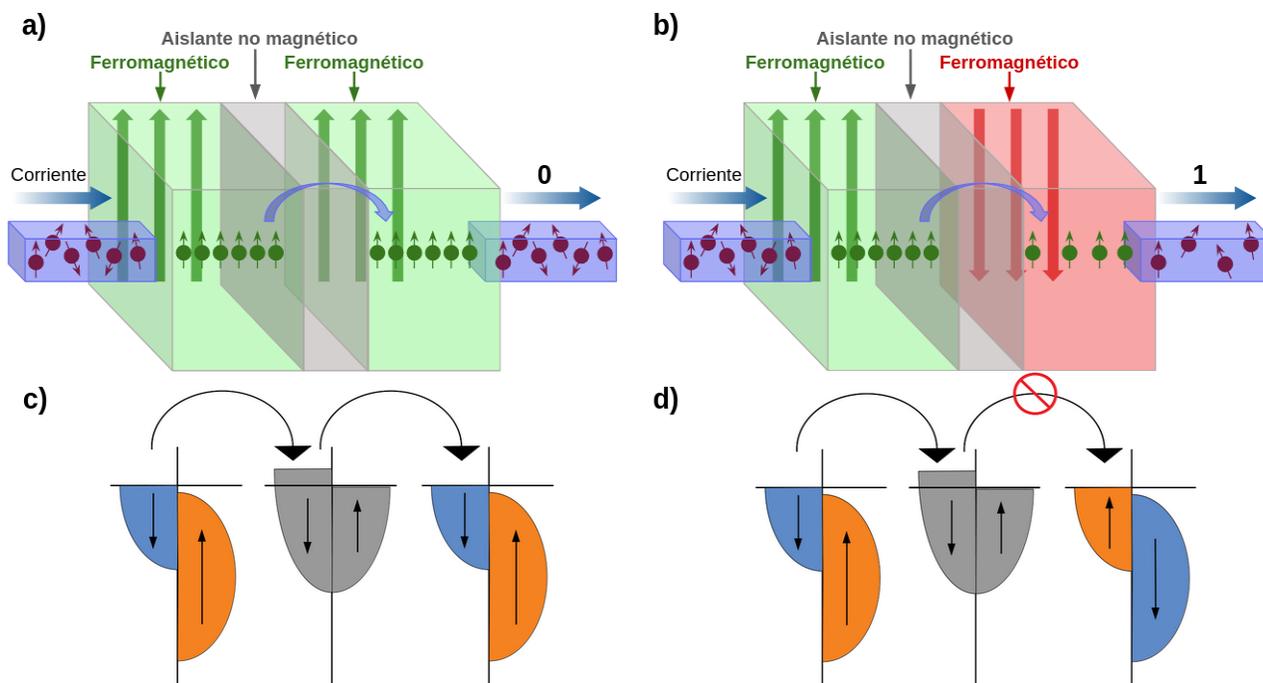


Figura 1.4: Estructura de un dispositivo de unión de túnel magnética. a) Capas ferromagnéticas con magnetización paralela, b) con magnetización antiparalela. c) y d) esquema de la Densidad de estados en ambos arreglos.

mediante el efecto de túnel cuántico. Cuando la magnetización de ambas capas ferromagnéticas están orientadas en la misma dirección los electrones polarizados cruzan a la segunda capa ferromagnética mediante el efecto túnel. La densidad de electrones que pasan a la segunda capa es del 100% ya que existen estados que pueden ser ocupados por los electrones polarizados como se muestra en la Fig. 1.4c, de esta manera se puede interpretar la señal como "0"(Figura 1.4a). Por otro lado, cuando se invierte la magnetización de la segunda capa ferromagnética, se reduce el efecto túnel debido a que no existen estados que pueden ser ocupados por electrones polarizados como se esquematiza en la Fig. 1.4d, lo que se interpreta como un "1"(Figura 1.4b). En la Figura 1.4 se representa de forma gráfica la estructura de este dispositivo [42].

El estudio de materiales con características HM y PMA son de gran interés en el desarrollo de dispositivos espintrónicos. La combinación de ambas propiedades en un mismo material permitiría producir corrientes de espín polarizado, así como una magnetización perpendicular al plano del material con el fin de aumentar la densidad de almacenamiento de información.

# Capítulo 2

## 2.1. Antecedentes

### 2.1.1. Heteroestructuras Van der Waals

El estudio del grafeno ha promovido el surgimiento de nuevos campos de investigación, un ejemplo de esto son las heteroestructuras Van der Waals (VdW). Se trata de heteroestructuras y dispositivos hechos apilando diferentes cristales 2D uno encima del otro. El principio básico es simple: se coloca una monocapa encima de otra monocapa o de pocas capas y así sucesivamente. La pila resultante representa un material artificial ensamblado en una secuencia elegida, como en la construcción con Lego, con bloques definidos con precisión de un plano atómico. Los enlaces covalentes fuertes proporcionan estabilidad en el plano de los cristales 2D, mientras que las fuerzas de Van der Waals relativamente débiles son suficientes para mantener la pila unida (ver Figura 2.1a) [14].

Las heteroestructuras VdW se encuentran presentes en materiales como el grafito, en donde las monocapas unidas por enlaces VdW son grafenos. Otro ejemplo es el material  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  (CGT) en bulto, en este caso las monocapas están compuestas por una red de panal de átomos de Cr que comparte borde con octaedros de Te con los dímeros de Ge, como se muestra en la Figura 2.1b. La importancia de las heteroestructuras VdW en el desarrollo de microdispositivos es de gran interés, ya que las monocapas que conforman estas estructuras pueden ser fácilmente aisladas por el método epitaxial [37].

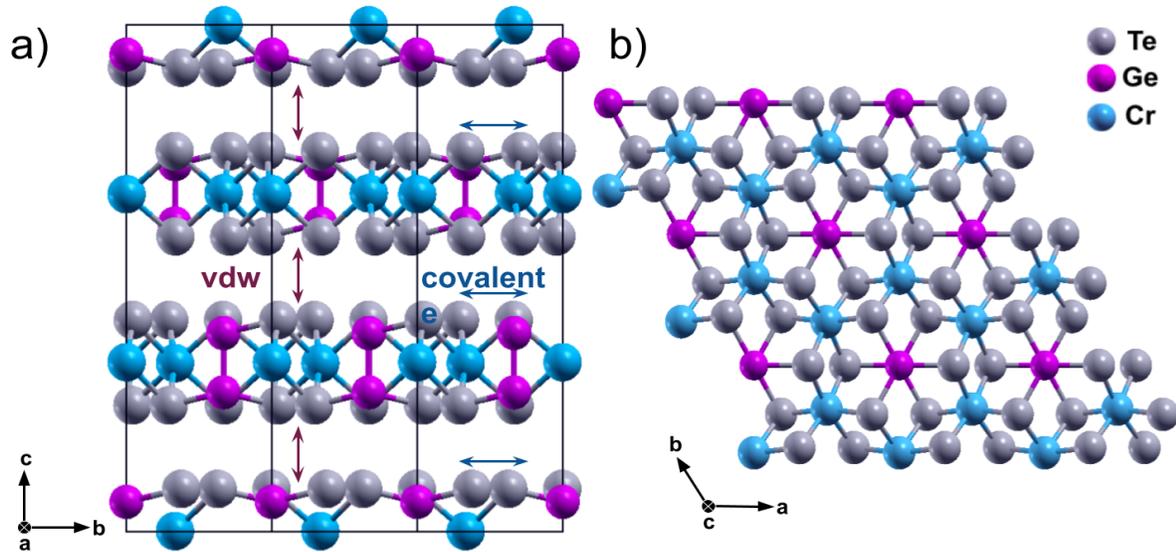


Figura 2.1: a) Esquematización de una heteroestructura  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  en una red  $1 \times 3 \times 1$ , b) monocapa que conforma la heteroestructura VdW.

### 2.1.2. $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ en bulto

El CGT, en su forma en bulto es un material ferromagnético con estructura de VdW. El CGT en bulto fue sintetizado en 1994 por Carteaux, *et al*; en este estudio se analizaron las propiedades estructurales, magnéticas y electrónicas. Se observó que el material en bulto tiene una estructura cristalina romboedral con un grupo espacial  $R\bar{3}$ . Por otro lado, el material presentó propiedades ferromagnéticas con una temperatura de Curie de 61 K, en cuanto a las propiedades electrónicas, el CGT en bulto se comporta como un metal [5].

En 2016, Zhang *et al.* [60] estudiaron la anisotropía magnética del material CGT y descubrieron que el eje fácil de magnetización se encuentra sobre el eje  $c$  del cristal. Asimismo, se concluyó que debajo de la temperatura de curie el CGT tiene propiedades aislantes. Las características presentes en el CGT en bulto lo hacen un candidato prometedor para su integración en el desarrollo de la tecnología de la información.

### 2.1.3. $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ bidimensional

En la actualidad la espintrónica 2D, basada en cristales VdW está obstaculizada por la falta de orden ferromagnético de largo alcance, la cual es crucial para los efectos magnéticos macroscópicos. La ausencia de orden ferromagnético en muchos cristales VdW 2D (por ejemplo, grafeno o  $\text{MoS}_2$ ) ha motivado esfuerzos para inducir intrínsecamente el magnetismo utilizando varios métodos: el primero es a través de la ingeniería de defectos, generar vacancias, agregar átomos, límites de grano o bordes [17, 35, 55, 6, 31]; la segunda es la introducción de especies magnéticas mediante intercalación o sustitución [8]; y la tercera es a través del efecto de proximidad magnética, mediante el cual los materiales 2D se colocan en contacto con otros sustratos magnéticos[16].

En 2017, Cheng Gong, *et al.* [16] descubrieron que CGT bidimensional es un material con propiedades ferromagnéticas intrínsecas, además, reportaron que es un ferromagnético suave, por lo que la magnetización del material cambia drásticamente al variar el campo magnético aplicado. Finalmente, diversos estudios computacionales y experimentales [50, 16] han demostrado que la monocapa de CGT presenta propiedades ferromagnéticas semiconductoras, además de tener anisotropía magnética perpendicular.

## 2.2. Justificación

El  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  ha sido estudiado de forma teórica y experimental, en forma de bulto así como en monocapa presentando propiedades ferromagnéticas semiconductoras y anisotropía magnética perpendicular. Sin embargo, no existen estudios de este material en su forma de nanocintas, así como del efecto que tienen los bordes de las nanocintas en su estabilidad termodinámica y en sus propiedades eléctricas y magnéticas. Conocer dichas propiedades de las nanocintas CGT son de gran importancia para su potencial aplicación en la espintrónica y el desarrollo de nanodispositivos.

En el presente trabajo de tesis, se estudió el efecto de borde en la estabilidad termodinámica de nanocintas CGT así como sus propiedades electrónicas y magnéticas por medio de cálculos de primeros principios basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés) y se describieron las propiedades electrónicas y magnéticas de

las nanocintas más estables. Los materiales ferromagnéticos semiconductores son de gran interés para el campo de la espintrónica, por lo que el estudio de nanomateriales con estas propiedades generaría un desarrollo significativo en el ámbito tecnológico. Es por esto que se proporciona un estudio estructural, electrónico y magnético de nanocintas de  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  para su desarrollo experimental en el futuro.

## 2.3. Hipótesis

- Los bordes de las nanocintas de CGT influyen en la estabilidad termodinámica de las mismas, así como en sus propiedades electrónicas y magnéticas.

## 2.4. Objetivos

### 2.4.1. Objetivo General

- Estudiar las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de las nanocintas CGT mediante cálculos de primeros principios.

### 2.4.2. Objetivos Particulares

- Estudiar el material en su forma 3D.
- Construir y estudiar el CGT en forma de monocapa.
- Definir y construir los distintos modelos de las nanocintas
- Estudiar la estabilidad termodinámica de las diferentes nanocintas mediante el formalismo de energías de formación.
- Estudiar las propiedades electrónicas y magnéticas de las nanocintas más estables.

# Capítulo 3

## 3.1. Marco Teórico

### 3.1.1. Ecuación de Schrödinger y el problema de muchos cuerpos

La ecuación de Schrödinger describe un estado dentro de un sistema molecular en ausencia de un campo magnético y eléctrico, ésta ecuación independiente del tiempo y no relativista se describe de la siguiente manera:

$$\hat{H}\Psi_i = E_i\Psi_i \quad (3.1)$$

Donde  $\hat{H}$  es el operador Hamiltoniano de un sistema compuesto por M núcleos y N electrones. Dentro de este operador se encuentra la energía cinética de electrones y núcleos, así como las interacciones electrostáticas entre núcleos y electrones, y los potenciales repulsivos debidos a las interacciones núcleo-núcleo y electrón-electrón. Por otro lado,  $\Psi_i$  es la función de onda del estado i-ésimo del sistema, esta función contiene toda la información que se puede conocer del sistema cuántico. Por último,  $E_i$  es el valor numérico de la energía del estado descrito por  $\Psi_i$ .

Para sistemas de muchos cuerpos la función de onda  $\Psi$  depende de tres coordenadas espaciales para cada uno de los electrones, más coordenadas de espín, además de tres grados de libertad de los núcleos. Este problema se puede tratar de acuerdo con la aproximación de Born-Oppenheimer o núcleos sujetos, en donde la energía cinética de los núcleos es cero y la energía potencial de repulsión de las interacciones núcleo-núcleo son constantes, de

esta manera el operador  $\hat{H}$  se reduce a lo que se llama Hamiltoniano electrónico descrito por la siguiente expresión:

$$\hat{H}_{elec} = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} + \sum_{i=1}^N \sum_{j>1}^N \frac{1}{r_{ij}} = \hat{T} + \hat{V}_{Ne} + \hat{V}_{ee}. \quad (3.2)$$

Donde  $\hat{T}$  es la energía cinética de los electrones,  $\hat{V}_{ee}$  es la energía potencial de repulsión entre electrones y  $\hat{V}_{Ne}$  es la energía potencial de atracción electrostática entre iones y electrones. En la teoría del funcional de la densidad, el potencial atractivo ejercido por los núcleos ( $\hat{V}_{Ne}$ ) es el potencial externo ( $V_{ext}$ ), el cual incluye el campo nuclear y campos magnéticos y eléctricos externos. De este modo, la solución a las ecuación de Schrödinger con  $\hat{H}$  es la función de onda  $\Psi_{elec}$  y la energía electrónica  $E_{elec}$ . Por lo tanto, la energía total  $E_{tot}$  del sistema de núcleos fijos es la suma de la energía electrónica y nuclear.

$$E_{tot} = E_{elec} + E_{nuc} \quad (3.3)$$

$$E_{nuc} = \sum_{A=1}^M \sum_{B>A} \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \quad (3.4)$$

La interpretación física de la función de onda  $\Psi$  se puede asociar únicamente a la siguiente expresión:

$$|\Psi(\vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{X}_N)|^2 d\vec{X}_1 d\vec{X}_2 \dots d\vec{X}_N \quad (3.5)$$

que representa la probabilidad de encontrar a los electrones 1,2,...,N simultáneamente en un volumen  $d\vec{X}_1 d\vec{X}_2 \dots d\vec{X}_N$ . Debido a que los electrones son fermiones (partículas que tienen espín semi-entero) con espín =  $\pm 1/2$  y son indistinguibles,  $\Psi$  debe ser antisimétrica con respecto a coordenadas espaciales y de espín:

$$\Psi(\vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{x}_i, \vec{x}_j, \dots, \vec{X}_N) = -\Psi(\vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{x}_j, \vec{x}_i, \dots, \vec{X}_N). \quad (3.6)$$

Esta propiedad matemática de antisimetría está relacionada al principio de exclusión de Pauli, en el que dos electrones no pueden ocupar el mismo estado. Al intercambio de la posición de dos electrones con el mismo espín se le conoce como la propiedad de *intercam-*

*bio*, mientras que la propiedad de *correlación* se refiere a la interacción que existe entre los electrones de un sistema [29].

### 3.1.2. Teoría del funcional de la densidad

Para átomos distintos al átomo de hidrógeno se pueden obtener los estados cuánticos de los movimientos electrónicos, en teoría construyendo los operadores hamiltonianos y resolviendo la ecuación de Schrödinger. Sin embargo, cuando se busca resolver la ecuación de Schrödinger para átomos distintos al de hidrógeno, aparece el problema de muchos cuerpos. Es decir, el estado de movimiento no se puede resolver analíticamente para sistemas en los que interactúan tres o más masas distintas. Este problema de muchos cuerpos no es exclusivo de la mecánica cuántica, sino que es un problema clásico de la física analítica. Sin embargo, en 1928 Hartree propuso un método para resolver numéricamente la ecuación de Schrödinger de un sistema compuesto por múltiples electrones [22]. Posteriormente en 1930 Fock aplicó el determinante de Slater al método de Hartree y propuso el método de Hartree-Fock, el cual busca resolver numéricamente el problema de muchos cuerpos [10]. Esta aproximación se refiere a que cada electron se mueve debido a la acción de un campo electrostático creado por la presencia de otros electrones.

La teoría del funcional de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés) apareció en 1990 con el fin de resolver eficientemente cálculos en química cuántica. El concepto básico del DFT es hacer cálculos de sistemas de muchos electrones tomando como variable principal la densidad electrónica. Este concepto básico fue sugerido por Thomas en 1927 [53], donde un estado electrónico de un gas uniforme de electrones se asume como la solución a la ecuación de Schrödinger. En 1928 Fermi complementó la teoría de Thomas usando estadística, estableciendo lo que ahora se le conoce como el método de Thomas-Fermi; sin embargo éste método no es confiable, ya que no puede reproducir enlaces químicos cualitativamente.

### 3.1.3. Densidad electrónica

La densidad electrónica  $\rho(\vec{r})$  es la base de la teoría DFT, además determina la probabilidad de encontrar cualquier electrón dentro de un elemento de volumen. Esta densidad se

define con una integral múltiple sobre coordenadas de espín y sobre todas las coordenadas espaciales, la cual determina la probabilidad de encontrar cualquier electrón de un sistema compuesto por N electrones dentro de un elemento de volumen  $d\vec{r}_1$

$$\rho(\vec{r}) = N \int \cdots \int |\Psi(\vec{x}_1, \vec{x}_2, \dots, \vec{x}_N)|^2 ds_1 d\vec{x}_2 \dots d\vec{x}_N \quad (3.7)$$

$\rho(\vec{r})$  encuentra un electrón con espín arbitrario mientras que los otros N-1 electrones tienen posiciones arbitrarias. Debido a que los electrones son indistinguibles, la probabilidad de encontrar un electrón es N veces la probabilidad de encontrar un electrón en particular. A diferencia de la función de onda  $\Psi$ , la densidad electrónica es un observable que puede ser medido. En cualquier posición del átomo  $\rho(\vec{r})$  exhibe un máximo de valor finito, esto se debe a las fuerzas atractivas ejercidas por las cargas positivas del núcleo. Sin embargo, en la posición del átomo el gradiente de la densidad tiene una discontinuidad y se presenta una cúspide. La cual se debe a la singularidad presente en el Hamiltoniano  $\frac{Z_a}{r_{iA}}$  ya que  $r_{iA}$  tiende a cero.

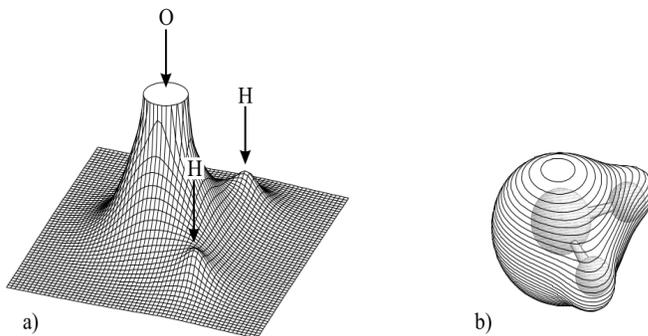


Figura 3.1: Gráfica de la densidad electrónica de la molécula de agua a) valores de  $\rho(\vec{r})$  proyectados en un plano que contienen los núcleos, b) forma tridimensional de la molécula envuelta por densidad electrónica constante (0.001 a.u.).

En la Figura 3.1 se representa la densidad electrónica de la molécula de agua de diferentes maneras. Se observa que en la figura 3.1a la densidad electrónica aumenta al aproximarse a la posición de los núcleos, mientras que en la figura 3.1b se muestra la densidad electrónica con un valor constante que envuelve a la molécula[29].

### 3.1.4. Teoremas de Hohenberg-Kohn

La teoría DFT se fundamenta en dos teoremas principales propuestos por Hohenberg y Kohn en 1964 [23]. El primero establece que el potencial externo  $V_{ext}(\vec{r})$  es una función única de la densidad electrónica  $\rho(\vec{r})$ ; ya que, a su vez,  $V_{ext}(\vec{r})$  fija  $\hat{H}$ , por lo que el estado fundamental completo de un sistema de muchas partículas es un funcional único de la densidad electrónica  $E(\rho(\vec{r}))$  (un funcional es solo una función que tiene otra función como argumento). Por lo tanto, el hamiltoniano y todas las propiedades del estado fundamental están determinadas por la densidad del estado fundamental.

La densidad del estado base permite la descripción del sistema, ya que contiene información sobre el número de electrones ( $N$ ), el número atómico del núcleo ( $Z_A$ ) y las posiciones ( $R_A$ ). Esta propiedad permite la obtención del hamiltoniano del sistema, la función de onda y la energía del estado base. Como la energía total del estado base es un funcional de la densidad electrónica del estado base, entonces las componentes individuales de la energía total del estado base también lo son

$$E_0[\rho_0] = T[\rho_0] + E_{ee}[\rho_0] + E_{Ne}[\rho_0] \quad (3.8)$$

Donde  $Ne$  es la atracción debida al núcleo. Es conveniente en este punto separar esta expresión de energía en la parte que dependen del sistema real, es decir, la energía potencial debida a la atracción núcleo-electrón,  $E_{Ne}[\rho_0] = \int \rho(\vec{r})V_{Ne}d\vec{r}$ , y en la parte que es universalmente válida, es decir que es independiente de  $N$ ,  $R_A$  y  $Z_A$

$$E_0[p_0] = \underbrace{\int \rho_0(\vec{r})V_{Ne}d\vec{r}}_{\text{sistema dependiente}} + \underbrace{T[\rho_0] + E_{ee}[\rho_0]}_{\text{funcional universal}}. \quad (3.9)$$

De esta manera se puede observar que el funcional de *Hohenberg-Kohn*  $F_{HK}[\rho_0]$  está conformado por los términos universalmente válidos, por lo que 3.9 se expresa de la siguiente manera

$$E_0[p_0] = \int \rho_0(\vec{r})V_{Ne}d\vec{r} + F_{HK}[\rho_0]. \quad (3.10)$$

Cuando el funcional de Hohenberg-Kohn toma como variable cualquier densidad  $\rho(\vec{r})$  genera el valor esperado  $\langle \Psi | \hat{T} + \hat{V}_{ee} | \Psi \rangle$ . Este valor esperado contiene información sobre la energía cinética ( $\hat{T}$ ) y sobre la repulsión electrón-electrón ( $E_{ee}[\rho]$ ).

El segundo teorema determina que la energía del estado fundamental dada por  $F_{HK}$  se puede obtener mediante un cálculo variacional, en donde la densidad electrónica que minimiza la energía total del sistema es exactamente la densidad del estado fundamental,  $\rho_0$  [52]. El objetivo del principio variacional es encontrar el estado base  $\Psi_0$  que optimice la energía del sistema, es decir que entregue la menor energía  $E_0$ ; este principio se empleó primero con base en la función de onda  $\Psi$ , sin embargo, puede utilizarse para la densidad electrónica [29].

### 3.1.5. Ecuaciones Kohn-Sham

Con los teoremas de Hohenberg-Kohn se puede demostrar la existencia de un funcional universal; sin embargo, la naturaleza de este funcional se desconoce así como la forma de calcular la densidad del estado base. Es por eso que Kohn-Sham propone una forma de resolver el problema, el cual se basa en estudiar la interacción entre N electrones con un sistema ficticio de N electrones que no interactúan entre sí, de esta manera se establecen las ecuaciones de Kohn-Sham, descritas por la siguiente expresión

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} + V_{ext}(\vec{r}) + V_H(\vec{r}) + V_{xc}(\vec{r})\right]\psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i\psi_i(\vec{r}) \quad (3.11)$$

En la ecuación 3.11 se puede observar una similitud con la ecuación de Schrödinger donde el potencial efectivo está compuesto por tres potenciales  $V_{ext}$ ,  $V_H$  y  $V_{xc}$ . El potencial  $V_{ext}$  representa la interacción núcleo-electrón. Por otro lado, el segundo potencial  $V_H$ , llamado potencial Hartree, que expresa la interacción electrón-electrón y está dado por la siguiente ecuación

$$V_H(\vec{r}) = e^2 \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3r' \quad (3.12)$$

Finalmente el término  $V_{xc}(\vec{r})$  es el potencial de intercambio y correlación que se define con la ecuación 3.13 y no se puede expresar de manera exacta, por lo que para conocer la

energía de intercambio y correlación se obtiene  $V_{xc}$  como la derivada funcional de  $E_{xc}$  con respecto a  $\rho$ .

$$V_{xc}(\vec{r}) = \frac{\delta E_{xc}}{\delta \rho} \quad (3.13)$$

El enfoque de Kohn-Sham es en principio exacto. La aproximación sólo entra cuando se tiene que definir el funcional desconocido para la energía de intercambio y correlación  $E_{xc}$  y el potencial  $V_{xc}$  correspondiente. La eficacia del método DFT se basa en encontrar la correcta aproximación de la energía de intercambio y correlación que mejor describa nuestro sistema

### 3.1.6. Aproximaciones para el funcional de intercambio y correlación

Las ecuaciones de Kohn-Sham permiten la obtención exacta de la mayoría de las contribuciones electrónicas de un sistema, sin embargo, las contribuciones desconocidas son incorporadas al potencial de intercambio y correlación ( $V_{xc}$ ). Las principales aproximaciones para definir  $E_{xc}$  son la Aproximación de Densidad Local (LDA, en acuerdo con sus siglas en inglés) y la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA, en acuerdo con sus siglas en inglés).

#### Aproximación de densidad local

En la aproximación LDA la nube electrónica es hipotéticamente homogénea, es decir que no cambia. Este es un sistema en el que el número de electrones  $N$  y el volumen  $V$  del gas de electrones tienden a infinito, mientras que la densidad de electrones, es decir  $N/V$ , es un valor finito igual a  $\rho$  y alcanza un valor constante en todas partes. Sin embargo, el modelo de un gas uniforme de electrones es una idealización lejana a cualquier situación realista en átomos o moléculas, los cuales se caracterizan por variar rápidamente su densidad electrónica. A pesar de que el modelo se basa en una idealización se puede representar  $E_{xc}$  con la siguiente ecuación:

$$E_{LDA}^{xc}[\rho] = \int \rho(r) \epsilon_{xc}(\rho(r)) dr \quad (3.14)$$

### Aproximación del gradiente generalizado

La aproximación GGA depende de la densidad electrónica en un punto  $\mathbf{r}$  y del gradiente de la densidad de carga  $\nabla\rho(\vec{r})$ , por lo que se considera que la densidad electrónica no es homogénea pero varía muy lentamente, propiedad presente en sistemas reales.

La aproximación de la densidad local se puede interpretar como el primer término de una expansión de Taylor de la densidad uniforme, esperando obtener mejores aproximaciones del funcional de intercambio y correlación la serie se extiende al siguiente término más bajo. Este funcional se puede escribir de la siguiente manera [29]:

$$E_{GGA}^{xc}[\rho] = \int \epsilon_{xc}(\rho(r), \nabla\rho) dr \quad (3.15)$$

Debido a que hay muchas formas en las que la información del gradiente de la densidad electrónica se puede incluir en un funcional GGA, hay una gran cantidad de funcionales GGA distintos. Dos de los funcionales más utilizados en los cálculos con sólidos son el funcional de Perdew-Wang (PW91) [2] y el funcional de Perdew-Burke-Ernzerhof [39] (PBE). Cada uno de estos funcionales son funcionales GGA, y se han desarrollado y utilizado docenas de otros funcionales GGA, particularmente para cálculos con moléculas aisladas [48].

#### 3.1.7. Ciclo Autoconsistente

En las ecuaciones de Kohn-Sham, el potencial efectivo es un funcional que depende de la densidad electrónica, la cual es una propiedad desconocida del sistema a estudiar. Para resolver el problema se emplea un método iterativo, en el que se estima la densidad electrónica total, posteriormente se usa esta densidad de prueba para definir el potencial efectivo. Con este potencial efectivo las ecuaciones de Kohn-Sham se resuelven numéricamente, definiendo una densidad electrónica inicial. Si la densidad electrónica inicial y la densidad electrónica final no coinciden o la diferencia entre ambas densidades no tiene un valor mínimo, entonces no se puede resolver el problema general. Por lo que las densidades electrónicas iniciales y finales se combinan para dar una nueva densidad electrónica de prueba. Esta nueva densidad de prueba se usa para definir un nuevo potencial efectivo

a partir del cual se encuentra una densidad electrónica actualizada, y así sucesivamente. Si tiene éxito, este proceso iterativo conducirá a una solución autoconsistente y se habrá encontrado la densidad electrónica del sistema, a este ciclo se le conoce como ciclo autoconsistente (SCF, por sus siglas en inglés), el cual se esquematizo en la Figura 3.2.

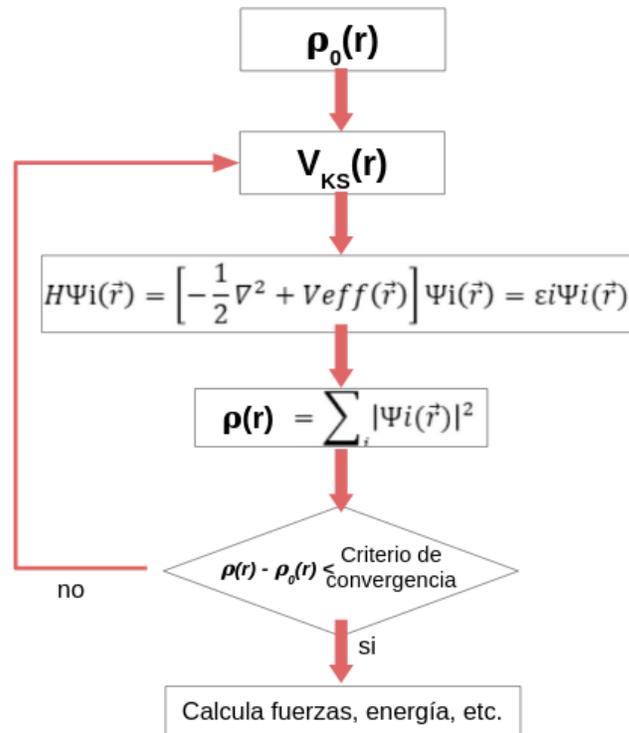


Figura 3.2: Esquema del ciclo autoconsistente empleado para cálculos DFT.

Sin embargo, no es conveniente comparar directamente dos soluciones para la densidad de electrones y determinar qué tan similares son, aunque esta es la prueba más directa para saber si se ha encontrado una solución autoconsistente. Un método más fácil de interpretar es calcular la energía correspondiente a la densidad electrónica después de cada iteración. Si las iteraciones convergen, entonces la diferencia de energía entre iteraciones consecutivas se aproximará a cero. Esto sugiere que las iteraciones se pueden detener una vez que la magnitud de la diferencia de energía entre las iteraciones cae por debajo de un parámetro de tolerancia elegido apropiadamente [48].

### 3.1.8. Interacciones Van der Waals

Las interacciones de Van der Waals ocurren cuando los átomos adyacentes se acercan lo suficiente como para que sus nubes de electrones exteriores apenas se toquen. Esta acción induce fluctuaciones de carga que dan como resultado una atracción no específica y no direccional [40]. Estas interacciones dependen en gran medida de la distancia, disminuyendo en proporción a la sexta potencia de la separación. Para la química y la física de grandes sistemas como, por ejemplo, en bio o nanoarquitecturas, las interacciones VdW son indispensables para alcanzar la precisión química [19].

La interacción de dispersión es una correlación electrónica pura entre dos cuerpos, que no puede incorporarse en la aproximación del campo medio de un cuerpo, y es una correlación de largo alcance que actúa explícitamente entre electrones distantes. Esta interacción de dispersión es la única interacción de van der Waals que no se incorpora en los cálculos de Kohn-Sham utilizando funciones de correlación convencionales [53]. Existen diversos métodos para estudiar las interacción VdW en DFT estos son: el funcional de van der Waals no localizado (VdW-DFT), potenciales centrados en el átomo con corrección de dispersión [DCACPs, en una variante llamada potenciales atómicos localizados (LAP)], funcionales de densidad "puros"(DFs) que son formas altamente parametrizadas de aproximaciones metahíbridas estándar y el método DFT-D [19].

El método DFT-D3 proporciona correcciones a la energía total molecular, el gradiente de energía y las frecuencias que se suman a los resultados obtenidos son casi cualquier aproximación de la teoría funcional de densidad convencional y también algunos otros enfoques comunes de campo medio. La principal ventaja de DFT-D3 es su eficiencia computacional y robustez en la tabla periódica, lo que hace que este enfoque sea particularmente valioso para el tratamiento de grandes sistemas [45]. Es por esto que en el presente trabajo de tesis se emplea el método DFT-D3 para tratar las interacciones VdW presentes en la estructura del material CGT.

### 3.1.9. Cálculos de espín órbita

El acoplamiento espín-órbita (SOC, de acuerdo a sus siglas en inglés) se encuentra en el núcleo de la materia condensada. Es fundamental para el magnetismo y la espintrónica, donde impulsa la anisotropía magnética, la relajación del espín, la amortiguación magnética, la magnetorresistencia anisotrópica y el efecto Hall anómalo. Debido a que la monocapa de CGT tiene un arreglo ferromagnético semiconductor se requieren incluir cálculos de espín-órbita.

El potencial de Coulomb ( $-e^2/r$ ) no proporciona información completa de la interacción que existe entre un electrón y un protón, por lo que se recurre a la corrección de *estructura fina*. Esta corrección emplea efectos relativistas, ya que el movimiento de los electrones y los protones dentro de un átomo puede ser relativo. Si un electrón orbita un núcleo, desde el punto de vista del núcleo, el campo eléctrico nuclear es fijo y el electrón se encuentra orbitando a su alrededor a una velocidad  $\mathbf{v}$ . Sin embargo, si nos paramos en el electrón, hipotéticamente, observaríamos que el núcleo se encuentra orbitando al electrón que está fijo. Para el electrón, el movimiento del núcleo constituye una corriente eléctrica que, como sabemos, produce un campo magnético..

En el marco de reposo de electrones, el protón se mueve a una velocidad  $-\vec{v}$  y produce un campo magnético

$$\mathbf{B} = -\frac{e\vec{v} \times \vec{r}}{c r^3} \quad (3.16)$$

La interacción del momento magnético del electrón ( $\mu$ ), asociado al espín, con el campo magnético da lugar a un cambio en la energía, ya que  $\mu$  tiende a alinearse con  $\mathbf{B}$ , esta energía se describe con la siguiente ecuación:

$$E_{SO} = -\mu \cdot \mathbf{B} = \frac{e}{mcr^3} \mu \cdot (\vec{p} \times \vec{r}) = -\frac{e}{mc} \frac{\mu \cdot \mathbf{l}}{r^3} \quad (3.17)$$

Donde  $m$ ,  $l$  y  $r$  son la masa del electrón, el número cuántico azimutal y la distancia entre el núcleo y electrón respectivamente. Con el cambio de energía el hamiltoniano del sistema también cambia, por lo que el hamiltoniano de espín-órbita se expresa de la siguiente

manera:

$$H_{SO} = -\frac{e^2}{2m^2c^2r^3}\mathbf{S} \cdot \mathbf{L} \quad (3.18)$$

De la ecuación anterior  $e$ ,  $\mathbf{S}$  y  $\mathbf{L}$  representan la carga del electrón, el momento magnético de espín y el momento magnético orbital, respectivamente. En conclusión, la interacción espín-órbita da como resultado un cambio en la energía de los electrones [47, 18].

### 3.1.10. Corrección de Hubbard

El modelo de Hubbard es capaz de incluir la llamada “repulsión in situ”, que se deriva de la repulsión de Coulomb entre electrones en los mismos orbitales atómicos y, por lo tanto, puede explicar la transición entre el comportamiento conductor y aislante de estos sistemas. Basado en este modelo, el nuevo hamiltoniano se puede formular con un término aditivo de Hubbard que describe explícitamente las interacciones electrónicas.

Inspirado en el modelo de Hubbard (U), el método DFT+U está formulado para mejorar la descripción del estado fundamental de los sistemas correlacionados. La principal ventaja del método DFT+U es que está dentro del ámbito de DFT, por lo que no requiere un esfuerzo significativo para implementarse en los códigos DFT existentes y su costo computacional es solo un poco más alto que el de los cálculos DFT normales. Esta corrección “U” se puede agregar a los funcionales de densidad locales y semilocales que ofrecen operaciones computacionales LDA+U y GGA+U. El papel básico de la corrección U es tratar la fuerte interacción de Coulomb in situ de los electrones localizados con un término similar al de Hubbard. El hamiltoniano de Hubbard describe los estados electrónicos fuertemente correlacionados (orbitales  $d$  y  $f$ ), mientras trata el resto de los electrones de valencia mediante las aproximaciones DFT normales. Para la implementación práctica de DFT+U en química computacional, la fuerza de las interacciones en el sitio se describe mediante un par de parámetros: el término de Coulomb en el sitio U y el término de intercambio en el sitio J. Estos parámetros 'U y J' pueden ser extraídos de cálculos ab initio, pero por lo general se obtienen semiempíricamente. La implementación de DFT+U requiere una comprensión clara de las aproximaciones en las que se basa y una evaluación precisa de las condiciones bajo las cuales se puede esperar que proporcione predicciones cuantitativas

precisas.

El método LDA+U está ampliamente implementado para corregir el funcional de intercambio y correlación DFT. El LDA+U funciona de la misma manera que el método LDA estándar para describir los electrones de valencia, y solo para los estados electrónicos fuertemente correlacionados (los orbitales d y f), se implementa el modelo de Hubbard para un modelado más preciso. Por lo tanto, la energía total del sistema (LDA+U) suele ser la suma del funcional de energía LDA estándar ( $E_{LDA}$ ) para todos los estados y la energía del funcional de Hubbard que describe los estados correlacionados [7].

## 3.2. Metodología

### 3.2.1. Detalles computacionales

Para estudiar el material CGT en su forma en bulto, monocapa y nanocintas, se implementaron cálculos de primeros principios basados en la teoría funcional de la densidad (DFT) utilizando el código PWscf del paquete Quantum ESPRESSO (QE) [15] con pseudopotenciales que emplean el método del Proyector de Ondas Aumentadas (PAW, por sus siglas en inglés) [3]. Además, las energías de intercambio-correlación se trataron de acuerdo con la aproximación de gradiente generalizado (GGA)[38], mediante la parametrización PBE. En cuanto a las interacciones de van der Waals se incorporaron utilizando el método Grimme DFT-D3 [19].

Por otro lado, para estudiar las propiedades electrónicas y magnéticas se implementaron cálculos de spin-órbita y se incorporó el término de Hubbard (U) con un valor de 3.9 eV, en los cálculos usamos el método simplificado GGA+U. Cabe mencionar que en todos los cálculos se empleó una energía de corte de 42 Ry, donde la densidad de carga de corte sigue la regla de ser ocho veces la energía de corte. Finalmente, para estudiar la energía de anisotropía magnética se utilizó el paquete Vienna *Ab initio* Simulation Package (VASP) [12, 13, 11, 28] con una energía de corte de 450 eV y condiciones similares establecidas en los cálculos con QE.

### 3.2.2. Determinación de las Nanocintas

El material en bulto se optimizó con un mallado de puntos- $k$   $9 \times 9 \times 3$ , posteriormente se tomó como base para la construcción de la monocapa con puntos- $k$   $4 \times 4 \times 1$ . La monocapa se optimizó con un espacio vacío en  $c$  de  $10 \text{ \AA}$ .

Una vez optimizada la monocapa de CGT, se construyeron siete nanocintas en una supercelda de  $3 \times 3$  con un espacio vacío en  $c$  de  $10 \text{ \AA}$ . Las terminaciones de borde definidas son las siguiente: terminación TeGe en ambos bordes de la nanocinta (TG/TG), terminaciones de TeCr en ambos bordes (TC/TC), terminaciones de TeCr en el borde izquierdo y de TeGe en el borde derecho (TC/TG), borde de TeGe en el lado izquierdo y borde de TeCr en el lado derecho (TG/TC), ambos bordes de TeCr con vacancias de Te en ambos bordes (TC- $V_{Te}$ / TC- $V_{Te}$ ), en el borde izquierdo terminación de TeGe y en el borde derecho terminación de TeCr con vacancias de Te en ambos bordes (TG- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ ), y una nanocinta con borde de TeGe y vacancias de Ge vacancias en la región izquierda, y en la región derecha borde de TeCr con vacancias de Cr (TG- $V_{Ge}$ /TC- $V_{Cr}$ ). Después de definir las siete nanocintas con diversas terminación se realizó un análisis de su estabilidad termodinámica, para estudiar las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de las nanocintas más estables.

# Capítulo 4

## Resultados y Discusión

### 4.1. Propiedades estructurales de CGT en bulto y monocapa

El primer paso para construir las nanocintas es optimizar los parámetros de red del CGT en bulto y posteriormente optimizar la monocapa. El material en bulto presenta una estructura cristalina hexagonal con parámetros de red optimizados  $a = b = 7 \text{ \AA}$  y en  $c = 20.6 \text{ \AA}$ , que concuerdan con los valores experimentales de  $a = b = 6.83 \text{ \AA}$  y  $c = 20.56 \text{ \AA}$ , reportados por Zhenqi Hao, *et al* en 2018 [21]. En la Figura 4.1a se muestra la estructura en bulto del material en estudio. Se observa que este material presenta una estructura laminar con fuertes enlaces químicos en el plano, mientras que fuera del plano, las capas están unidas por interacciones débiles de VdW.

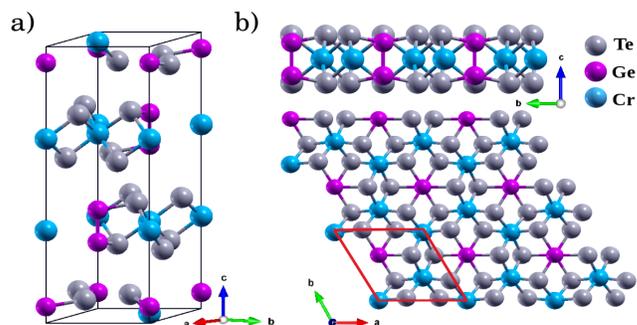


Figura 4.1: Estructura cristalina mostrada del material CGT en su forma en a)bulto y en b)monocapa.

Por otro lado, la monocapa presenta un parámetro de red optimizado en  $a$  de 6.9 Å, concordante con valores reportados de 6.857 Å y 6.8275 Å, por Kangying Wang, *et al* en 2019 [56] y por A.K. Nair, *et al* en 2020 [34], respectivamente. Ambas estructuras en bulto y monocapa constan de una red en forma de panal de abeja formada por átomos de Cr como se muestra en la Figura 4.1, donde cada Cr está contenido en el centro de un octaedro de Te, también se puede observar que dentro de la estructura existen dímeros de Ge mostrados en la vista lateral de la Figura 4.1b.

En la tabla 4.1 se muestran las longitudes de los enlaces presentes en el material de CGT en su forma bidimensional y en su forma en bulto. Se observa que los enlaces Te-Ge aumentan 0.01 Å, mientras que los enlaces de Te-Cr aumentan 0.02 Å en la monocapa con respecto al material en bulto. Por otro lado, los enlaces Ge-Ge disminuyen 0.26 Å en la monocapa con respecto al bulto.

Tabla 4.1: Longitudes de enlace de los enlaces presentes en la estructura 2D y 3D de CGT.

Enlaces	Longitud (Å)	
	Monocapa	Bulto
Te-Ge	2.62	2.61
Te-Cr	2.78	2.76
Ge-Ge	2.14	2.4

## 4.2. Nanocintas de CGT

### 4.2.1. Estabilidad termodinámica

A partir de la estructura optimizada de la monocapa se propusieron siete arreglos atómicos de las nanocintas con diversas terminaciones de borde, con el fin de encontrar las configuraciones más estables. Estos modelos se construyeron en una supercelda 3x3 con un espacio vacío en la dirección  $z$  y en la dirección  $a$  de 10 Å y 13 Å, respectivamente. Asimismo, se optimizó cada nanoestructura resultando un valor óptimo de  $b=20.46$  Å. Los modelos de las nanocintas estudiadas se muestra en la Figura 4.2.

En la Figura 4.3 se muestran las vacancias marcadas en las nanocintas TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ , TG- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  y TG- $V_{Ge}$ /TC- $V_{Cr}$ ; los círculos rojos, amarillos y verdes representan las

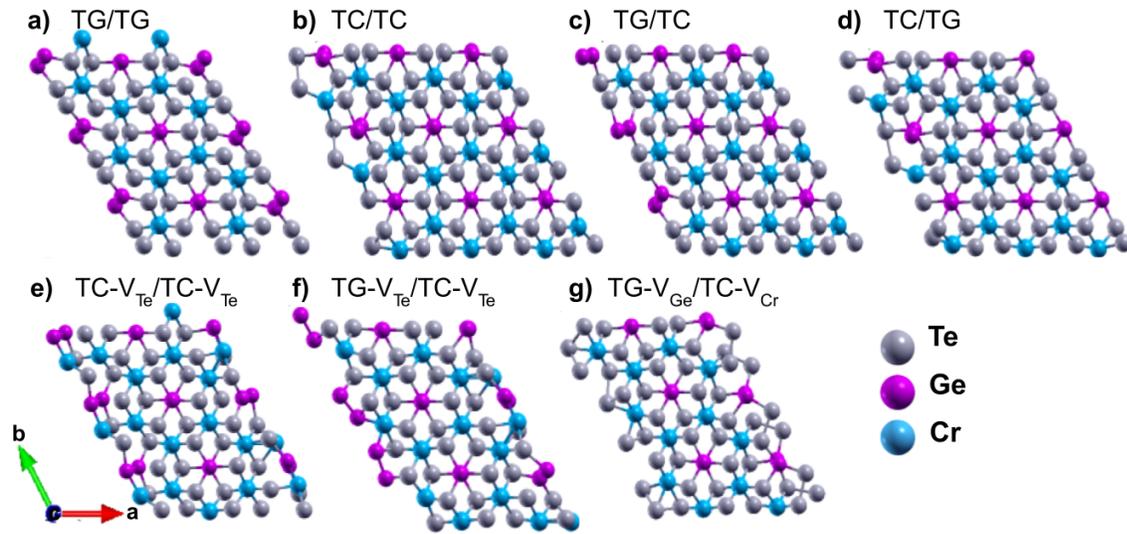


Figura 4.2: Nanocintas CGT con diferentes terminaciones de borde. (a) TG/TG: bordes de TeGe en ambos lados de la nanocinta, (b) TC/TC: bordes de TeCr en ambos lados de la nanocinta, (c) TC/TG: borde de TeCr en la región izquierda y TeGe en la derecha región, (d) TG/TC: TeGe borde en el lado izquierdo, TeCr en el lado derecho de la nanocinta, (e) TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ : TeGe bordes, Te vacantes en ambos bordes, (f) TG- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ : TeGe en el borde izquierdo y TeCr en el borde derecho, Te vacancias en ambos bordes, y (g) TG- $V_{Ge}$ /TC- $V_{Cr}$ : TeGe borde y Ge vacantes en la región izquierda, y TeCr borde con Cr vacantes en la región derecha.

vacancias de Te, Ge y Cr, respectivamente, mostradas en las nanocintas con terminaciones TC/TC, TG/TC y TG/TC (ver Figura 4.3 a, d y g, respectivamente). Asimismo, en la Figura 4.3 b, e y h se observan las nanocintas antes de la relajación y finalmente en c, f e i se pueden ver las estructuras relajadas.

El objetivo principal es describir los bordes de nanocintas CGT más estables en diferentes condiciones de crecimiento. Para explicar la estabilidad a través de cantidades termodinámicas estándar (energías libres y potenciales químicos), debemos poner la monocapa CGT en equilibrio termodinámico. Esto con la finalidad de intercambiar átomos con el reservorio con el que está en equilibrio y tomar en cuenta el cambio de energía generado por estos intercambios atómicos [43]. En nuestro caso, siete arreglos atómicos posibles con diferente número de átomos emergen en los bordes de las nanocintas. Dado que los sistemas no poseen el mismo número de átomos, la energía total no es un criterio

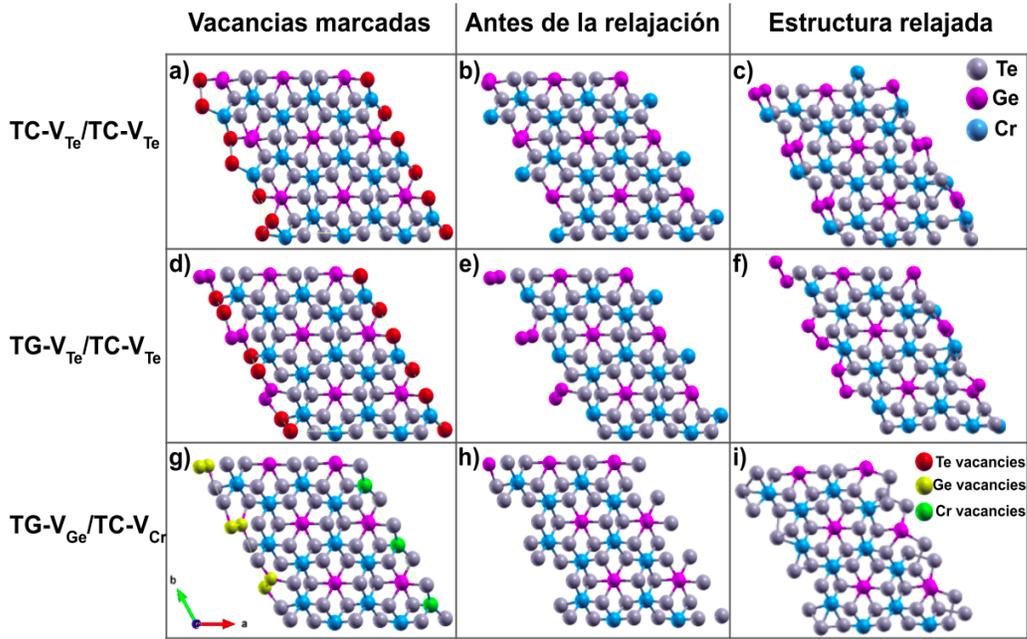


Figura 4.3: Vacancias estudiadas en nanocintas CGT. Modelo TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ : con vacantes marcadas como átomos rojos (a), antes de la relajación (b) y después de la relajación (c). La nanocinta TG- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  destacó las vacantes como átomos rojos (d), antes (e) y después (f) de la relajación atómica. (g), (h) e (i) muestran la nanocinta TG- $V_{Ge}$ /TC- $V_{Cr}$  con vacantes marcadas como átomos amarillos y verdes, antes y después de la relajación, respectivamente.

de estabilidad para discernir entre modelos. En cambio, el formalismo termodinámico de energía de formación es independiente del número de átomos, por lo que ayudará a aclarar la estabilidad de los diferentes bordes de las nanocintas de CGT. Comparamos la energía de formación de varios bordes para determinar el más favorable para aparecer en el experimento.

Para estudiar la estabilidad termodinámica de las nanocintas se empleó el formalismo de energía de formación de bordes, de acuerdo con el procedimiento previamente reportado en el trabajo de Bollinger, Mikkel en 2003 [4]. Se definió la energía de formación ( $\gamma$ ) de las nanocintas, de la siguiente manera:

$$\gamma = \frac{1}{A} [G_{nanocinta} - n_{Cr}\mu_{Cr} - n_{Ge}\mu_{Ge} - n_{Te}\mu_{Te}]. \quad (4.1)$$

donde  $A$  es el área del nanocinta,  $G_{nanocinta}$  es la energía total de la nanocinta correspon-

diente a las energías obtenidas de los cálculos realizados en DFT,  $n_i$  y  $\mu_i$  es el número de átomos presentes en cada estructura y el potencial químico, respectivamente donde  $i$  puede ser  $Cr$ ,  $Ge$  o  $Te$ . La nanocinta más estable será la que minimice  $\gamma$ . La ecuación de energía de formación para el borde nos permitirá conocer los rangos de potenciales químicos en los que existe la estructura con la configuración de borde más estable. Debido a que las nanocintas CGT se encuentran en equilibrio con su forma en bulto ( $\mu_{Cr_2Ge_2Te_6}^{bulto} = 2\mu_{Cr} + 2\mu_{Ge} + 6\mu_{Te}$ ), se resolvió el potencial químico en bulto y se estableció al potencial químico de Cr de manera implícita, posteriormente se sustituyó en la ecuación 4.1 y se obtuvo,

$$\gamma = \frac{1}{A} [G_{nanocinta} - \frac{n_{Cr}}{2} \mu_{Cr_2Ge_2Te_6} + \mu_{Ge}(n_{Cr} - n_{Ge}) + \mu_{Te}(3n_{Cr} - n_{Te})] \quad (4.2)$$

Una vez que se definió  $\gamma$  se establecieron los límites de las condiciones químicas impuestas por la entalpía de formación del CGT ( $\Delta H_f^{CGT}$ ), por lo que los límites son:  $-\Delta H_f^{CGT} \leq \mu_{Ge} \leq 0$ , correspondientes a las condiciones pobres y ricas de Ge y  $-\frac{\Delta H_f^{CGT}}{3} \leq \mu_{Te} \leq 0$ , el cual describe las condiciones pobres y ricas de Te, respectivamente. Posteriormente se evaluó la ecuación 4.2, considerando diferentes límites termodinámicos y se graficaron los planos de energía de formación los cuales son mostrados en la Figura 4.4. Los planos revelan que la nanocinta TC/TC son las estructuras más estables para condiciones de Ge-rico, Te-rico y Ge-pobre, Te-rico, y condiciones intermedias de crecimiento. Por otro lado, se observa que las vacantes estabilizan los bordes de TeCr (TC-V<sub>Te</sub>/TC-V<sub>Te</sub>) para un rango reducido de potenciales químicos que corresponden a condiciones de Ge-rico, Te-pobre y Ge-pobre, Te-pobre.

En la Tabla 4.2 se muestran los valores de las energías de formación en eV de las nanocintas estudiadas.

Tabla 4.2: Energías de formación de las nanocintas más estables en diferentes condiciones de crecimiento.

Condiciones de crecimiento		Energías de formación de borde (eV)	
		TC/TC	TC-V <sub>Te</sub> /TC-V <sub>Te</sub>
Ge-rico	Te-rico	0.058	0.101
Ge-pobre	Te-rico	0.058	0.101
Ge-rico	Te-pobre	0.061	0.055
Ge-pobre	Te-pobre	0.061	0.055

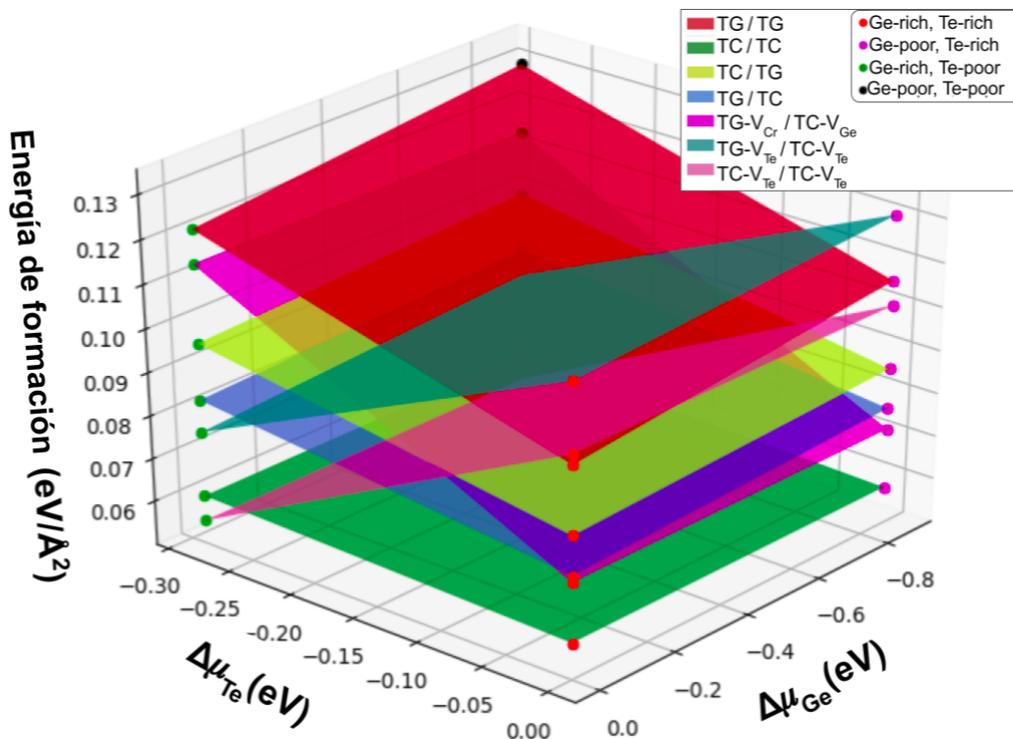


Figura 4.4: Planos de la energías de formación de nanocintas de CGT.

#### 4.2.2. Propiedades estructurales

Una vez que se obtuvieron las nanocintas más estables se realizó un análisis estructural para observar el cambio en las longitudes de enlace presentes en los bordes. Asimismo, se compararon los enlaces de la monocapa (Tabla 4.1) con respecto a los enlaces existentes en cada nanocinta.

En la Figura 4.5a y b se muestran las estructuras de las nanocintas TC/TC y TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ , respectivamente. Para realizar un análisis estructural las nanocintas se dividen en dos regiones; región izquierda (RI) en azul y región derecha (RD) en verde. Estas regiones se definieron en las estructuras antes de la relajación con el fin de identificar los enlaces presentes en los bordes de las nanocintas. Los efectos de borde generan enlaces de Te-Te, Cr-Cr y Cr-Ge en RI y RD que no están presentes en la monocapa. En la nanocinta TC/TC se observa que en RI se generan enlaces Te-Te con una longitud promedio de 2.812 Å (ver Figura 4.5c). Por otro lado, la nanocinta con bordes de TeCr y vacancias de Te presenta enlaces Cr-Cr con una longitud promedio de 2.887 Å en RD y enlaces Cr-Ge con promedio

de 2.515 Å en RD y RI (ver Figura 4.5d).

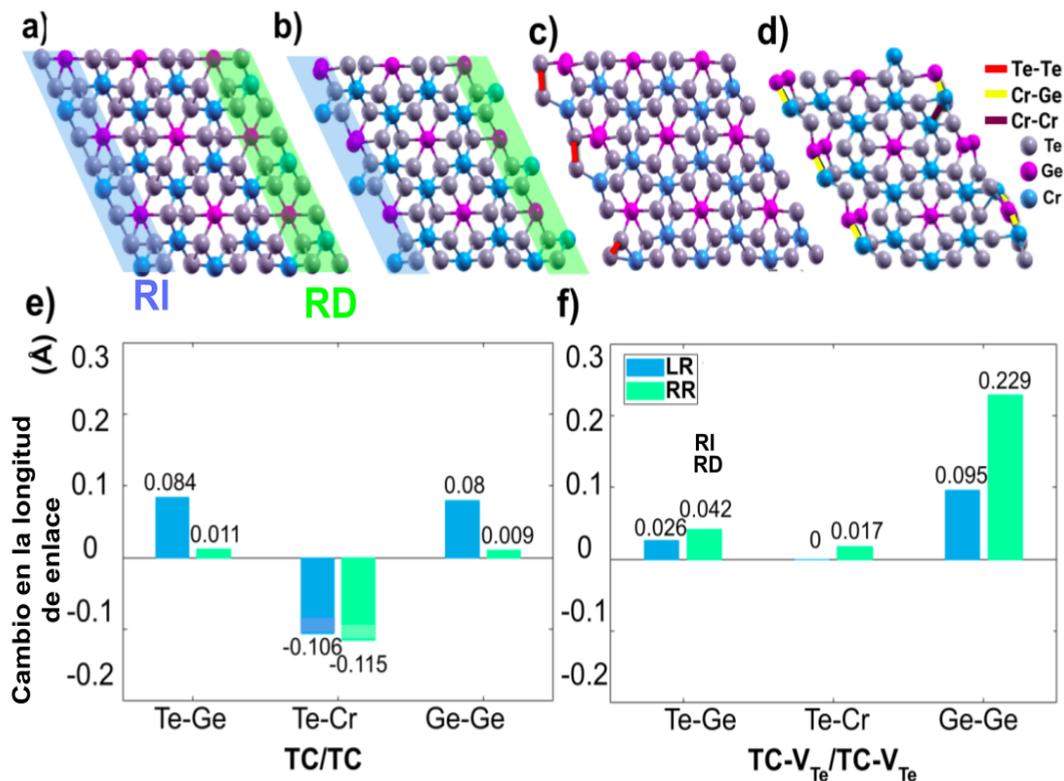


Figura 4.5: Estructura atómica de las nanocintas estables: a) bordes TC/TC y b) bordes TC-V<sub>Te</sub>/TC-V<sub>Te</sub> antes de la relajación. La región izquierda (RI) y la región derecha (RD) están resaltadas en azul y verde como las dos primeras capas atómicas del borde. c) Bordes TC/TC y d) Bordes TC-V<sub>Te</sub>/TC-V<sub>Te</sub> después de la relajación que muestran los cambios estructurales en las dos primeras capas atómicas y los nuevos enlaces formados, e) El cambio en las longitudes de enlace en la nanocinta TC/TC con respecto a la monocapa, y f) El cambio en las longitudes de enlace en la nanocinta TC-V<sub>Te</sub>/TC-V<sub>Te</sub> en función de las distancias de la monocapa. Las líneas rojas, amarillas y negras que se muestran en los bordes corresponden a los nuevos enlaces Te-Te, Cr-Ge y Cr-Cr, respectivamente, que aparecen debido a la formación de las nanocintas.

En la Figura 4.5 e y f representamos la longitud de enlace promedio de los enlaces presentes en las regiones RI y RD de cada nanocinta con respecto a los enlaces de la monocapa. Para la nanocinta TC/TC (Figura 4.5e), se observa que los enlaces Te-Ge y Ge-Ge en el borde RI aumentan en 0.084 Å y 0.080 Å, respectivamente, mientras que los enlaces Te-Cr disminuyen su longitud en 0.106 Å como efecto de borde que estabiliza la estructura, junto con la formación de enlaces Te-Te. Por otro lado, los enlaces Te-Ge y Ge-Ge en RD

presentan un cambio casi insignificante de 0.011 Å y 0.009 Å, respectivamente. Finalmente, los enlaces Te-Cr disminuyen 0.115 Å, un efecto de estabilización similar al del borde izquierdo de la nanocinta que está relacionado con la contracción de los enlaces Te-Cr. En la nanocinta TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  (Figura 4.5f), los enlaces Te-Ge y Ge-Ge aumentan su longitud en 0.026 Å y 0.095 Å, respectivamente, en RI. Por el contrario, los enlaces Te-Cr permanecen sin cambios con respecto a la distancia de la monocapa. Aquí el borde se estabilizó debido a la formación de enlaces Cr-Ge. Finalmente, en RD, Te-Ge, Te-Cr y Ge-Ge enlaces aumentan en 0.042 Å, 0.017 Å y 0.229 Å, respectivamente. Aquí asociamos el efecto de estabilización a la formación de enlaces Cr-Ge y dímeros Cr-Cr.

### 4.2.3. Propiedades electrónicas

En esta sección, calculamos la estructura de bandas electrónicas y la densidad de estados de las dos nanocintas más estables. Como se ha discutido ampliamente en la literatura, los átomos de Cr poseen orbitales  $d$  altamente localizados que generan altas correlaciones [26]. Los cálculos DFT polarizados de espín estándar no pueden describir completamente las propiedades electrónicas, por lo que considerar la corrección de Hubbard en el sitio es una forma de modelar orbitales altamente correlacionados. Comúnmente, el término  $U$  se establece para explicar correctamente el carácter magnético o electrónico de los materiales. Este término se puede optimizar de forma empírica [1]. Sin embargo, existen otras formas de optimizar  $U$  teóricamente mediante el uso de datos obtenidos del funcional HSE06 [59] y mediante un enfoque de respuesta lineal autoconsistente [30]. Para incluir el término  $U$  en los cálculos, usamos el método simplificado GGA+ $U$  presentado por Dudarev [9]. Estudios previos sobre la monocapa CGT han encontrado un valor  $U$  de 3.9 eV, obtenido a través del método de respuesta lineal [32], este valor es empleado para calcular las propiedades electrónicas de las nanocintas CGT más estables.

Para hacer una primera observación de las propiedades electrónicas de las nanocintas más estables se obtuvieron las densidades de estados (DOS) por medio de cálculos no autoconsistentes, (NSCF). En la Figura 4.6a y b la DOS de las nanocintas TC/TC y TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ , respectivamente, revelan que el canal mayoritario de espín  $\uparrow$  presenta características metálicas, mientras que el canal minoritario de espín  $\downarrow$  se comporta como

un semiconductor. Este comportamiento es propio de materiales HM por lo que se concluye que las nanocintas TC/TC y TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  exhiben propiedades HM.

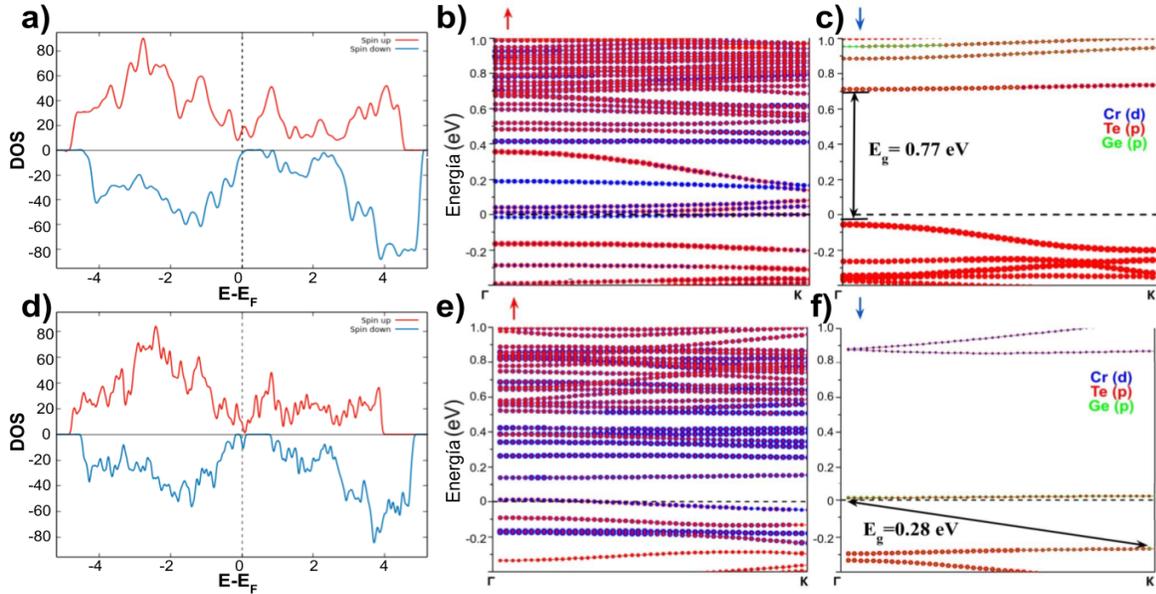


Figura 4.6: Densidad de estados total de nanocintas (a) TC/TC y (d) TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ . Estructura de bandas de orbital proyectado de las nanocintas CGT: (b) y (c) muestran los canales de espín mayoritario y minoritario de la nanocinta TC/TC, respectivamente. (e) y (f) representan las contribuciones de espín mayoritarias y minoritarias de la nanocinta TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ . La energía de Fermi se establece en cero. El tamaño de los círculos representa cada contribución orbital.

Por otro lado, en la Figura 4.6b y c se muestran las contribuciones orbitales en la estructura de bandas de la nanocinta TC/TC. El canal de espín minoritario tiene propiedades semiconductoras con una banda directa de 0.77 eV, mientras que el canal mayoritario es metálico. El comportamiento metálico aparece debido a los orbitales Te-p y Cr-d híbridos en el nivel de Fermi. A energías más bajas, los orbitales Te-p son los que tienen mayores contribuciones, mientras que para energías positivas los orbitales Cr-d y Te-p contribuyen casi por igual. En la parte semiconductor, la nanocinta TC/TC presenta un máximo de banda de valencia (VBM) dominado por orbitales Te-p, mientras que el mínimo de banda de conducción (CBM) también está poblado por orbitales Te-p, con una ligera contribución proveniente de orbitales Ge-p y Cr-d. En este caso, el comportamiento electrónico está dominado por la contribución de los átomos de borde. Tomando en cuenta que los enlaces en forma de cadena Te-Te y Te-Cr aparecen en el borde RI, mientras que

los enlaces Te-Cr se forman en el borde RD debido a la interrupción de la periodicidad, lo que conduce a características electrónicas dominadas por orbitales Te.

De la misma manera, la estructura de bandas proyectada de la nanocinta TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  muestra un comportamiento metálico para el canal minoritario (Figura 4.6e) y semiconductor en el canal mayoritario con una banda indirecta de energía prohibida  $E_g=0.28$  eV (Figura 4.6f). En este caso, el comportamiento metálico en el canal mayoritario con energías positivas y negativas, se debe a contribuciones de orbitales Te-p y Cr-d. A pesar de que no hay átomos de Te en la primera capa RI y RD de la nanocinta, los átomos de Te de la segunda capa son los que contribuyen al comportamiento electrónico del espín mayoritario debido al reordenamiento estructural. Por el contrario, en el canal de espín minoritario (Figura 4.6f) las propiedades electrónicas cambian. El CBM está formado principalmente por orbitales Ge-p y Te-p con una pequeña contribución de orbitales Cr-d. En este caso, las propiedades electrónicas que se ven en esta nanocinta se deben a la formación de enlaces Cr-Ge, Ge-Ge y Cr-Te en la parte RI de la cinta y Ge-Ge, Cr-Cr, Te-Cr, y enlaces Te-Te en el borde RD. La transición indirecta en la brecha de banda se deben principalmente a las vacantes de Te que generan estados electrónicos de Ge-p cerca del nivel de Fermi debido a la formación de dímeros de Ge-Ge en ambas regiones de nanocintas (RI y RD). Este resultado es de gran importancia para el desarrollo de dispositivos de unión de túnel magnética, ya que los materiales HM son capaces de generar corrientes de espín polarizado. Debido a que la brecha prohibida del canal minoritario es más ancha, en la nanocinta TC/TC, existe un mayor rango de energías en las cuales se puede obtener una corriente de espín polarizada, por lo que se puede considerar a esta estructura de mayor interés para su potencial aplicación en dispositivos MTJ.

#### 4.2.4. Propiedades Magnéticas

Para concluir el estudio de las nanocintas de CGT, se realizaron análisis de anisotropía magnética (MAE). La MAE se obtiene a través de la diferencia de energía entre la dirección de magnetización en el plano y fuera del plano [44]. Los materiales con anisotropía magnética perpendicular encuentran muchas aplicaciones en dispositivos de espintrónica [54, 46, 61] entre ellos MTJ [36, 33]. Los resultados muestran que la dirección energética-

mente favorable de la magnetización espontánea en ambas nanocintas está fuera de plano en la dirección [001]. En la Tabla 4.3 se muestran las energías relativas del eje fácil de magnetización en ambas nanocintas con respecto al eje  $z$ . Se ha demostrado que la aparición de PMA débil en CGT se relaciona con un acoplamiento de intercambio anisotrópico entre átomos de Cr-3d a través de orbitales Te-5p, que presentan un fuerte acoplamiento espín-órbita [51]. Este efecto puede reducirse en el límite de la monocapa, convirtiéndolo en un comportamiento de Heisenberg, donde la anisotropía de forma puede ser más fuerte que la anisotropía magnetocristalina [24]. Por otro lado, la aparición de PMA en las nanocintas CGT TC/TC puede estar relacionada con un acoplamiento de intercambio anisotrópico mejorado entre los átomos de Cr-3d debido a las distancias Cr-Cr generadas por el reordenamiento atómico del borde.

Tabla 4.3: Energías relativas del eje fácil de magnetización respecto a la dirección [001]

Direcciones	Energías (meV)	
	TC/TC	TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$
[0.68 1 0]	6.5	8.1
[0 0 1]	0	0
[0 1 0]	10.5	7.9
[1 0 0]	5.5	7.7
[1 1 0]	2.0	9.4

Posteriormente, se analizaron los momentos magnéticos presentes en ambas nanocintas y en sus bordes los cuales se compararon con los momentos magnéticos de los átomos en la monocapa. En la Tabla 4.4 se observa que los momentos magnéticos de los átomos de Cr tienen mayor magnitud en las nanocintas TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  y TC/TC por  $0.17 \mu_B$  y  $0.20 \mu_B$ , respectivamente. Además, los Cr que se encuentran en los bordes de las TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  y TC/TC nanocintas aumentan su momento magnético  $0.44 \mu_B$  y  $0.36 \mu_B$  con respecto a la monocapa. Por otro lado, los momentos magnéticos de los átomos de Ge no presentan comportamiento magnético. Por último, los átomos de Te presentan un cambio en la magnitud de los momentos magnéticos de  $0.02\mu_B$  a  $0.03 \mu_B$  en los bordes, se observa que los momentos magnéticos de los átomos de Te se alinean antiferromagnéticamente con respecto a los Cr.

Tabla 4.4: Momentos magnéticos de los átomos presentes en la monocapa y las nanocintas

Átomos	Momentos magnéticos ( $\mu_B/\text{átomos}$ )				
	Monocapa	TC/TC		TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$	
		Nanocinta	Borde	Nanocinta	Borde
Cr	3.60	3.80	3.96	3.77	4.04
Ge	0.02	0.01	0.01	-0.00	-0.01
Te	-0.17	-0.17	-0.15	-0.17	-0.14

Los resultados obtenidos de las propiedades magnéticas muestran que las nanocintas de CGT presentan propiedades de gran interés para el desarrollo de dispositivos MTJ ya que ambas estructuras tienen anisotropía magnética perpendicular y efecto Half-metal. Esta característica es conferida al material por los efectos de bordes en el material.

# Capítulo 5

## Conclusiones

En el presente trabajo se presentó un estudio de estabilidad termodinámica, estructural, así como un análisis de las propiedades electrónicas y magnéticas de nanocintas de CGT empleando cálculos basados en la teoría del funcional de la densidad. En el estudio de estabilidad termodinámica se empleó el formalismo de energías de formación de borde y se demostró que la nanocinta TC/TC es la estructura más estable en condiciones Ge-rico, Te-rico, y Ge-pobre, Te-rico. Mientras que la nanocinta TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  es estable en condiciones de Ge-rico, Te-pobres y en condiciones Ge-pobre, Te-pobre.

Por otro lado, en el estudio estructural se observó que debido a la ruptura de la periodicidad para formar las nanocintas, se generan nuevos enlaces en las estructuras. En la nanocinta TC/TC se generan enlaces de Te-Te en RI, mientras que en la nanocinta TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$  se generan enlaces Cr-Cr en RD y Cr-Ge en RI. Además en esta última estructura se puede observar la presencia de enlaces tipo cadena en RI.

Además, se analizaron las propiedades electrónicas de las nanocintas CGT. Se encontró que las dos nanocintas más estables de CGT exhiben propiedades HM, con la parte metálica dominada por los orbitales Te-p y Cr-d. Se pudo concluir que en la nanocinta TC/TC el canal minoritario tiene una brecha prohibida de energías más ancha en comparación a la nanocinta TC- $V_{Te}$ /TC- $V_{Te}$ . Este resultado es muy valioso para el desarrollo de dispositivos espintrónicos, ya que materiales HM son capaces de producir corriente de espín polarizada. Finalmente, en el estudio de propiedades magnéticas se encontró que ambas nanocintas presentan anisotropía magnética perpendicular. De esta manera se puede concluir que la

nanocinta con bordes de TeCr y bordes de TeCr con vacancias de Te son de gran interés para el desarrollo dispositivos de acceso aleatorio de memoria que empleen el principio de unión de túnel magnético.

## 5.1. Productos obtenidos

El presente trabajo ha sido expuesto en los siguientes congresos nacionales e internacionales: March meeting organizado por la Sociedad Americana de Física (16 de marzo, 2021), XV Congreso Internacional de Química de Materiales (MC15) (12 de junio, 2021), IV Coloquio en Simulaciones Computacionales en ciencia (25 de agosto, 2021), en cual se premió la presentación del trabajo, y el LXVI Congreso Nacional de Física (6 de octubre, 2021). Con los resultados obtenidos se escribió un artículo científico titulado '*Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> Nanoribbons with Perpendicular Magnetic Anisotropy and Half Metallicity: a DFT study*' que se encuentra bajo revisión en la revista *Journal of Physics D: Applied Physics* con la referencia JPhysD-130689 y el preprint ha sido publicado en arXiv con DOI: arXiv:2110.06053.

# Bibliografía

- [1] Keshab Bashyal y col. «Empirical optimization of DFT+ U and HSE for the band structure of ZnO». En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 30.6 (2018), pág. 065501.
- [2] Axel D Becke. «Density-functional thermochemistry. II. The effect of the Perdew–Wang generalized-gradient correlation correction». En: *The Journal of chemical physics* 97.12 (1992), págs. 9173-9177.
- [3] Peter E Blöchl. «Projector augmented-wave method». En: *Physical review B* 50.24 (1994), pág. 17953.
- [4] MV Bollinger, Karsten Wedel Jacobsen y Jens Kehlet Nørskov. «Atomic and electronic structure of MoS<sub>2</sub> nanoparticles». En: *Physical Review B* 67.8 (2003), pág. 085410.
- [5] V Carteaux y col. «Crystallographic, magnetic and electronic structures of a new layered ferromagnetic compound Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub>». En: *Journal of Physics: Condensed Matter* 7.1 (1995), pág. 69.
- [6] J Červenka, MI Katsnelson y CFJ Flipse. «Room-temperature ferromagnetism in graphite driven by two-dimensional networks of point defects». En: *Nature Physics* 5.11 (2009), págs. 840-844.
- [7] Matteo Cococcioni. «The LDA+ U approach: A simple hubbard correction for correlated ground states». En: *Correlated Electrons: From Models to Materials Modeling and Simulation* 2 (2012), págs. 4-4.
- [8] Mildred S Dresselhaus. «Intercalation in layered materials». En: *MRS Bulletin* 12.3 (1987), págs. 24-28.

- [9] SL Dudarev y col. «Electron-energy-loss spectra and the structural stability of nickel oxide: An LSDA+ U study». En: *Physical Review B* 57.3 (1998), pág. 1505.
- [10] Vladimir Fock. «Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems». En: *Zeitschrift für Physik* 61.1 (1930), págs. 126-148.
- [11] Kresse G y Furthmüller J. «Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set». En: *Comput Mater Sci* 6.1 (1996), págs. 15-50.
- [12] Kresse G y Hafner J. «Ab initio molecular dynamics for liquid metals.» En: *Phys Rev B* 47.1 (1993), págs. 558-61.
- [13] Kresse G y Hafner J. «Ab initio molecular-dynamics simulation of the liquid-metalamorphous-semiconductor transition in germanium.» En: *Phys Rev B* 49.20 (1994), págs. 14251-69.
- [14] I. V. Geim A. K.; Grigorieva. «Van der Waals heterostructures.» En: *Nature* 499 (2013), págs. 419-425. DOI: 10.1038/nature12385. eprint: <http://dx.doi.org/10.1038/nature12385>.
- [15] Paolo Giannozzi y col. «QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials». En: *Journal of physics: Condensed matter* 21.39 (2009), pág. 395502.
- [16] Cheng Gong y col. «Discovery of intrinsic ferromagnetism in two-dimensional van der Waals crystals». En: *Nature* 546.7657 (2017), págs. 265-269.
- [17] Héctor González-Herrero y col. «Atomic-scale control of graphene magnetism by using hydrogen atoms». En: *Science* 352.6284 (2016), págs. 437-441.
- [18] David J Griffiths. *Introduction to quantum mechanics*. Pearson International Edition (Pearson Prentice Hall, Upper Saddle River, 2005), 1962.
- [19] Stefan Grimme y col. «A consistent and accurate ab initio parametrization of density functional dispersion correction (DFT-D) for the 94 elements H-Pu». En: *The Journal of chemical physics* 132.15 (2010), pág. 154104.
- [20] R.A. de Groot; F.M Muller. «New Class of Materials: Hal-Metallic Ferromagnets». En: *Physical Review Letters* 31 (2010). ISSN: 347-347. DOI: 10.1002/smj.842.

- [21] Zhenqi Hao y col. «Atomic scale electronic structure of the ferromagnetic semiconductor  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ». En: *Science Bulletin* 63.13 (2018), págs. 825-830.
- [22] Douglas R Hartree. «The wave mechanics of an atom with a non-Coulomb central field. Part I. Theory and methods». En: *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*. Vol. 24. 1. Cambridge university press. 1928, págs. 89-110.
- [23] P Hohenberg y WJPR Kohn. «Density functional theory (DFT)». En: *Phys. Rev* 136 (1964), B864.
- [24] Bevin Huang y col. «Layer-dependent ferromagnetism in a van der Waals crystal down to the monolayer limit». En: *Nature* 546.7657 (2017), págs. 270-273.
- [25] C. Hultquist G. Leygraf. *Material Science and Engineering*. Wiley, 1980. ISBN: 978-1-118-32457-8.
- [26] Viktor Ivady y col. «Theoretical unification of hybrid-DFT and DFT+ U methods for the treatment of localized orbitals». En: *Physical Review B* 90.3 (2014), pág. 035146.
- [27] Shun-ichi Iwasaki. «Perpendicular magnetic recording—Its development and realization». En: *Journal of magnetism and magnetic materials* 324.3 (2012), págs. 244-247.
- [28] Kresse G. JF. «Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set.» En: *Phys Rev B* 54.16 (1996), pág. 11169.
- [29] Wolfram Koch y Max C Holthausen. *A chemist's guide to density functional theory*. John Wiley Sons, 2015.
- [30] Heather J Kulik y col. «Density functional theory in transition-metal chemistry: A self-consistent Hubbard U approach». En: *Physical Review Letters* 97.10 (2006), pág. 103001.
- [31] Kathleen M McCreary y col. «Magnetic moment formation in graphene detected by scattering of pure spin currents». En: *Physical review letters* 109.18 (2012), pág. 186604.
- [32] Guido Menichetti, Matteo Calandra y Marco Polini. «Electronic structure and magnetic properties of few-layer  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ : the key role of nonlocal electron–electron interaction effects». En: *2D Materials* 6.4 (2019), pág. 045042.

- [33] Jamileh Beik Mohammadi y col. «Reduced exchange interactions in magnetic tunnel junction free layers with insertion layers». En: *ACS Applied Electronic Materials* 1.10 (2019), págs. 2025-2029.
- [34] AK Nair y SJ Ray. «Electronic phase-crossover and room temperature ferromagnetism in a two-dimensional (2D) spin lattice». En: *RSC Advances* 11.2 (2021), págs. 946-952.
- [35] RR Nair y col. «Spin-half paramagnetism in graphene induced by point defects». En: *Nature Physics* 8.3 (2012), págs. 199-202.
- [36] Masahiko Nakayama y col. «Spin transfer switching in Tb Co Fe/ Co Fe B/ Mg O/ Co Fe B/ Tb Co Fe magnetic tunnel junctions with perpendicular magnetic anisotropy». En: *Journal of Applied Physics* 103.7 (2008), 07A710.
- [37] KS Novoselov y col. «2D materials and van der Waals heterostructures». En: *Science* 353.6298 (2016), aac9439.
- [38] John P Perdew, Kieron Burke y Matthias Ernzerhof. «Generalized gradient approximation made simple». En: *Physical review letters* 77.18 (1996), pág. 3865.
- [39] JP Perdew, K Burke y M Ernzerhof. «Perdew, burke, and ernzerhof reply». En: *Physical Review Letters* 80.4 (1998), pág. 891.
- [40] Thomas D Pollard. «Cell motility and cytokinesis: From mysteries to molecular mechanisms in five decades». En: *Annual review of cell and developmental biology* 35 (2019), págs. 1-28.
- [41] Valdemar Poulsen. *Method of recording and reproducing sounds or signals*. US Patent 661,619. Nov. de 1900.
- [42] G.A. Prinz. «Magnetoelectronics». En: *Science's Compass* 282.5394 (1998), pág. 1660. URL: <https://link.gale.com/apps/doc/A53588736/HRCA?u=anon~f6b2dc00&sid=googleScholar&xid=f3dcfe68>.
- [43] Guo-Xin Qian, Richard M Martin y DJ Chadi. «First-principles study of the atomic reconstructions and energies of Ga-and As-stabilized GaAs (100) surfaces». En: *Physical Review B* 38.11 (1988), pág. 7649.

- [44] et al. Ren W ning Jin K juan. «Tunable electronic structure and magnetic anisotropy in bilayer ferromagnetic semiconductor  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ .» En: *Sci Rep* 11.1 (2021), págs. 1-9. eprint: <https://doi.org/10.1038/s41598-021-82394-y>.
- [45] Alberto Otero de la Roza y Gino A DiLabio. *Non-covalent Interactions in Quantum Chemistry and Physics: Theory and Applications*. Elsevier, 2017.
- [46] M Salaheldeen y col. «Tuning nanohole sizes in Ni hexagonal antidot arrays: large perpendicular magnetic anisotropy for spintronic applications». En: *ACS Applied Nano Materials* 2.4 (2019), págs. 1866-1875.
- [47] Ramamurti Shankar. *Principles of quantum mechanics*. Springer Science & Business Media, 2012.
- [48] David Sholl y Janice A Steckel. *Density functional theory: a practical introduction*. John Wiley & Sons, 2011.
- [49] J.C. Slonczewski. «Current-driven excitation of magnetic multilayers». En: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 159.1 (1996), págs. L1-L7. ISSN: 0304-8853. DOI: [https://doi.org/10.1016/0304-8853\(96\)00062-5](https://doi.org/10.1016/0304-8853(96)00062-5). URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0304885396000625>.
- [50] Changsheng Song y col. «Surface-vacancy-induced metallicity and layer-dependent magnetic anisotropy energy in  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$ ». En: *Journal of Applied Physics* 126.10 (2019), pág. 105111.
- [51] M Suzuki y col. «Magnetic anisotropy of the van der Waals ferromagnet  $\text{Cr}_2\text{Ge}_2\text{Te}_6$  studied by angular-dependent XMCD». En: *arXiv preprint arXiv:2109.05715* (2021).
- [52] Attila Szabo y Neil S Ostlund. *Modern quantum chemistry: introduction to advanced electronic structure theory*. Courier Corporation, 2012.
- [53] Takao Tsuneda. «Density functional theory in quantum chemistry». En: (2014).
- [54] Bharati Tudu y Ashutosh Tiwari. «Recent developments in perpendicular magnetic anisotropy thin films for data storage applications». En: *Vacuum* 146 (2017), págs. 329-341.

- [55] Bruno Uchoa y col. «Localized magnetic states in graphene». En: *Physical review letters* 101.2 (2008), pág. 026805.
- [56] Kangying Wang y col. «Magnetic and electronic properties of Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> monolayer by strain and electric-field engineering». En: *Applied Physics Letters* 114.9 (2019), pág. 092405.
- [57] Mengxing Wang y col. «Tunnel junction with perpendicular magnetic anisotropy: Status and challenges». En: *Micromachines* 6.8 (2015), págs. 1023-1045.
- [58] Lawrence Yang Lin H; Livermore. *Half-metallic Materials and Their Properties*. Wiley, 2014.
- [59] Maituo Yu y col. «Machine learning the Hubbard U parameter in DFT+ U using Bayesian optimization». En: *npj Computational Materials* 6.1 (2020), págs. 1-6.
- [60] Xiao Zhang y col. «Magnetic anisotropy of the single-crystalline ferromagnetic insulator Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub>». En: *Japanese Journal of Applied Physics* 55.3 (2016), pág. 033001.
- [61] Shishun Zhao y col. «Low-voltage control of (Co/Pt) x perpendicular magnetic anisotropy heterostructure for flexible spintronics». En: *ACS nano* 12.7 (2018), págs. 7167-7173.



# La Sociedad Mexicana de Física

Agradece la participación de:

**Valeria Ríos Vargas**

Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad  
Nacional Autónoma de México

en el **LXIV Congreso Nacional de Física**  
del 4 al 8 de octubre de 2021, Tijuana, Baja California, EN LINEA

*Ana María Cetto*

**Dra. Ana María Cetto Kramis**  
Presidenta de la SMF

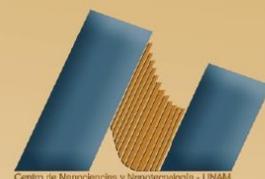


TECNOLÓGICO  
NACIONAL DE MÉXICO





# IV COLOQUIO DE SIMULACIONES COMPUTACIONALES EN CIENCIAS

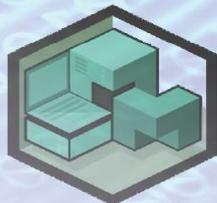


Certifica que

**Valeria Ríos Vargas**  
participó con la plática titulada

**En el IV Coloquio de Simulaciones Computacionales en Ciencias**

**del 23 al 27 de agosto de 2021 CNyN-UNAM**



Dr. Jonathan Guerrero Sánchez  
Comité Organizador  
Centro de Nanociencias y Nanotecnología  
Universidad Nacional Autónoma de México

Dr. Fernando Rojas Íñiguez  
Director  
Centro de Nanociencias y Nanotecnología  
Universidad Nacional Autónoma de México



## Bulletin of the American Physical Society

### APS March Meeting 2021

Monday–Friday, March 15–19, 2021; Virtual; Time Zone: Central Daylight Time, USA

#### Session H71: Poster Session I

2:00 PM, Tuesday, March 16, 2021

#### Abstract: H71.00223 : Border effect in the Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> nanoribbons: a stability study through Density Functional Theory\*

← Abstract →

##### Presenter:

Valeria Ríos Vargas

(Center for Nanosciences and Nanotechnology National Autonomous University of Mexico)

##### Authors:

Valeria Ríos Vargas

(Center for Nanosciences and Nanotechnology National Autonomous University of Mexico)

Rodrigo Ponce

(Center for Nanosciences and Nanotechnology National Autonomous University of Mexico)

María Guadalupe Moreno Armenta

(Center for Nanosciences and Nanotechnology National Autonomous University of Mexico)

Jonathan Guerrero Sanchez

(Center for Nanosciences and Nanotechnology National Autonomous University of Mexico)

The Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> compound is an intrinsic ferromagnetic material with a van der Waals layered structure that shows great promise in spintronic applications. In this work, we investigated the edge effect in the formation of Cr<sub>2</sub>Ge<sub>2</sub>Te<sub>6</sub> nanoribbons with different edges as well as the change in electronic and magnetic properties, by spin-polarized calculations. We study the thermodynamic stability of the nanoribbon employing the surface formation energy formalism. According to the calculations, at Ge- and Te-poor conditions and Ge-poor Te-rich conditions, the nanoribbon terminated in Te-Cr is the most stable structure, also, at the limits Te- and Ge-rich conditions and Ge-rich Te-poor conditions, the most stable structure corresponds to a combination of Cr-Te and Te-Ge edges.

\*We thank DGAPA-UNAM projects IN110820, IG200320, and IA100920. Calculations performed in DGCTIC-UNAM Supercomputing Center (LANCAD-UNAM-DGTIC-150 and LANCAD-UNAM-DGTIC-368).



Valeria Ríos &lt;g7\_rios18@ens.cnyn.unam.mx&gt;

---

## Thank you for attending the 15th International conference on materials chemistry (MC15)

1 mensaje

---

### 15th International conference on materials chemistry (MC15)

<15thInternationalconferenceonmaterialschemistryMC1@ineventmail.com>

Responder a: no-reply@inevent.com

Para: g7\_rios18@ens.cnyn.unam.mx

15 de julio de  
2021, 9:30

Dear Valeria

Thank you for participating in the *15th International conference on materials chemistry (MC15)*. Over 500 of you joined us from 48 different countries. We enjoyed meeting you all and hope that you enjoyed the scientific discussions and the opportunity to network online.

We have a few post-event notices for your attention:

- We are delighted to confirm that our poster prize winners were:

**Materials for a changing future:** Mehak Jain, Jasmin Omar, Annie Regan

**Materials for design and development:** Souvik Ghosh, Ann-Kathrin Müller, Baiyu Wang

**Materials for energy:** Trevor Kalkus, Jinsun Lee, Helen Tunstall-Garcia

**Materials for life:** Rachel Irlam, Harsimran Kaur, Marwa M.I. Rizk

The standard of posters was excellent, and it was a very difficult decision. Many congratulations to you all.

- The recordings of the sessions will be available to view and they will remain available to view until the end of August. An email will be sent out once the recordings are available to view. They can only be accessed by you as registered delegates using your personal registration link to the platform.
- The oral and poster abstract books, and the posters on iPoster, will also be available to download/view until the end of August.

### Help improve our events – MC15 survey

In order to develop and improve our events we would like to better understand our delegates' experience at MC15. We hope you'll be able to help us by taking 10 minutes to fill in our [MC15 feedback survey](#).

**Sustainability**

Our discussions at MC15 emphasised how the chemical sciences play a pivotal role in solving the challenges associated with sustainability. [Find out more about the Royal Society of Chemistry's perspectives on a range of issues related to sustainability](#), including research reports, campaigning materials, policy positions and engagement activities.

**Royal Society of Chemistry membership**

If you're not already part of our membership community, it's not too late to join and continue building your network, sharing ideas and collaborating with leaders in your field. As an event delegate we would like to offer you a complimentary affiliate membership. To accept this offer, please register with us at [membership.rsc.org/affiliate](https://membership.rsc.org/affiliate) and use the promotional code EVENT100.

Best wishes

RSC Events team

Do you wish to stop receiving our emails? [Click here to unsubscribe](#)

[View in browser](#)