

# ESTUDIO AB-INITIO DE LA DENSIDAD DE ESTADOS DEL ÓXIDO DE ALUMINIO, UTILIZANDO DFT

**Fís. Mario Rafael Nolasco Estrada**  
Fac. de Ciencias, UNAM

[mnolasco@ciencias.unam.mx](mailto:mnolasco@ciencias.unam.mx)

## Resumen

En este trabajo presentamos los fundamentos de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) para resolver el problema de la dinámica electrónica en sólidos cristalinos, herramienta fundamental para el estudio de las propiedades electrónicas de este tipo de sistemas. Estudiamos un sistema de óxido de aluminio ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ ) depositado sobre una superficie de grafeno. Utilizamos el paquete computacional Quantum ESPRESSO [1] y XcrySDen [2] para el cálculo de la dinámica molecular y la visualización, respectivamente.

## REFERENCIAS:

[1] Scandolo S, Gianozzi P, Cavazzoni C, de Girono S, Pasquarello A, Baroni S, Z Kristallogr 2005; 220: 574-9.

[2] A. Kokalj, XCrySDen—a new program for displaying crystalline structures and electron densities, J. Mol. Graph. Model. 17 (1999)176–179.