

CONVOCATORIA ABIERTA DE POSTULANTES A

BECAS CIN 2019

(Becas de Estímulo a las Vocaciones Científicas

del Consejo Interuniversitario Nacional)

Del 2 de Septiembre al 4 de Octubre de 2019.

Tema: Física Experimental y Computacional en Materia Condensada: Propiedades Estructurales, Electrónicas, Magnéticas e Hiperfinas en Óxidos Semiconductores Dopados

Directores: Dr. Mario Rentería (Inv. Principal CONICET, Prof. Titular UNLP) - Dr. Germán N. Darriba (Inv. Adjunto CONICET, Prof. Adjunto UNLP)

Lugar de Trabajo: Grupo Física de Impurezas en Materia Condensada (PhI) @ Área Materia Condensada y Física de Materiales / Línea Estructura Electrónica en Materia Condensada, **Instituto de Física La Plata** (IFLP, CONICET-UNLP, CCT CONICET La Plata), Diag. 113 y 63, **Departamento de Física** (FCE, UNLP).

- **Requisitos de la beca:** Estudiantes **avanzados** de la Lic. en Física (50 % o más del total de materias de la carrera aprobado), que no superen los 30 años de edad (al 31/12/2019), con un promedio mínimo de 6 (seis) puntos (incluyendo aplazos) y que no hayan sido beneficiarios de una beca EVC CIN con anterioridad.

(Bases) <https://nextcloud.cic.gba.gob.ar/index.php/s/1qGKkTIFmZqdmAV#pdfviewer>

(Convocatoria) https://www.gba.gob.ar/cic/becas_de_entrenamiento

Para la inscripción y las consultas, el CIN desarrolló un micrositio (<http://evc.cin.edu.ar/>) dentro de su web que incluye el reglamento, las bases y todas las planillas modelo para facilitar la inscripción.

Consulta rápida: <http://secyt.presi.unlp.edu.ar/Wordpress/?p=6618> (sitio de la Secretaría de Ciencia y Técnica de la UNLP).

Los interesados enviar CV y certificado analítico (del SIU) a renteria@fisica.unlp.edu.ar o darriba@fisica.unlp.edu.ar, en lo posible antes del viernes 20 de Septiembre.

A través de una convocatoria abierta permanente, aspiramos a incorporar al grupo de investigación estudiantes con inclinación hacia la Física Experimental y Computacional, con miras a la realización del Trabajo de Diploma y posterior Tesis Doctoral, preferentemente (pero no excluyente) con conocimiento de inglés, promedio general de la carrera mayor a 8 (ocho) y buena regularidad en la carrera.

Síntesis: En los últimos 20 años, el grupo de investigación ha focalizado su interés en temas de Física del Estado Sólido. En particular, se han investigado óxidos semiconductores y aisladores de interés tecnológico, en *bulk*, y las propiedades y fenómenos que se originan al doparlos con impurezas metálicas. Se desarrolló para ello un doble abordaje [1] experimental

(con técnicas subnanoscópicas hiperfinas, lo que se conoce como *Nuclear Solid-State Physics*) y de cálculos de estructura electrónica a partir de primeros principios (*ab initio*) de los materiales dopados [2-7], abordaje aplicado más recientemente al estudio de sistemas de menor dimensionalidad, como son las superficies [8]. Como los observables que se miden dependen fuertemente de la asimetría de la densidad electrónica muy cercana al núcleo atómico de las sondas-impurezas, para obtener buenas predicciones y modelizaciones confiables del sólido es imprescindible una descripción muy precisa y exacta de dicha densidad en el sistema *impureza-huésped*, alcanzable en la actualidad gracias a la alta precisión de estos métodos de cálculo. Durante este período se han establecido fructíferas colaboraciones con grupos experimentales y teóricos de Alemania, Bélgica, Brasil y Uruguay, y se ha recibido financiamiento sostenido del CONICET y la UNLP, dando lugar a varias Tesinas de Licenciatura y Tesis Doctorales en Física.

[1] Anisotropic Relaxations Introduced by Cd Impurities in Rutile TiO_2 : First-Principles Calculations and Experimental Support, L.A. Errico, G. Fabricius, M. Rentería, P. de la Presa, and M. Forker. **Physical Review Letters** **89**, 55503 (2002).

[2] Metal Impurities in an Oxide: Ab Initio Study of Electronic and Structural Properties of Cd in Rutile TiO_2 , L.A. Errico, G. Fabricius, and M. Rentería. **Physical Review B** **67**, 144104 (2003).

[3] First-Principles and TDPAC Study of Structural and Electronic Properties of Ta-Doped TiO_2 Semiconductor, G. N. Darriba, L. A. Errico, P. D. Eversheim, G. Fabricius, and M. Rentería. **Physical Review B** **79**, 115213 (2009); **Phys. Rev. B** **84**, 239903(E) (2011).

[4] *Ab initio* LSDA and LSDA+*U* study of pure and Cd-doped cubic lanthanide sesquioxides, D. Richard, E. L. Muñoz, M. Rentería, L.A. Errico, A. Svane, and N. E. Christensen. **Physical Review B** **88**, 165206 (2013).

[5] Ab Initio Study of Structural, Electronic, and Hyperfine Properties of n-type SnO_2 :Ta Semiconductor, Germán N. Darriba, Emiliano L. Muñoz, Leonardo A. Errico, and Mario Rentería. **The Journal of Physical Chemistry C** **118**, 19929-19939 (2014).

[6] Experimental and First-Principles Theoretical Study of Structural and Electronic Properties in Tantalum-Doped In_2O_3 Semiconductor: Finding a Definitive Hyperfine Interaction Assignment, Diego Richard, Germán N. Darriba, Emiliano L. Muñoz, Leonardo A. Errico, Paul D. Eversheim, and Mario Rentería. **The Journal of Physical Chemistry C** **120**, 5640-5650 (2016).

[7] Experimental TDPAC and Theoretical DFT Study of Structural, Electronic, and Hyperfine Properties in $(^{111}\text{In} \rightarrow ^{111}\text{Cd})$ -Doped SnO_2 Semiconductor: Ab Initio Modeling of Electron-Capture-Decay After-Effects Phenomenon, Germán N. Darriba, Emiliano L. Muñoz, Artur W. Carbonari, and Mario Rentería. **The Journal of Physical Chemistry C** **122**, 17423–17436 (2018).

[8] Electric field gradient study on pure and Cd-doped $\text{In}(111)$ surfaces: Correlation between experiments at the atomic scale and first-principles calculations, G. N. Darriba, R. Faccio, and M. Rentería. **Physical Review B** **99**, 195435 (2019).