

**CONVOCATORIA ABIERTA DE POSTULANTES A
BECA DE ENTRENAMIENTO de la CICpBA (BENTRE26)**

Inscripción: Del 19 de Mayo al 18 de Junio de 2025. **Inicio de la beca:** Abril 2026.

Tema: Física Experimental y Computacional en Materia Condensada: Propiedades Estructurales, Electrónicas, Magnéticas e Hiperfinas en Oxidos 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.

Requisitos de la beca: Estudiantes de la Lic. en Física cursando el último año, nacidos después del 1º de abril de 1992, y que tengan aprobadas, como mínimo, el 60% de las materias. La beca solo es compatible con un cargo de ayudante alumno.

(Convocatoria) <https://www.cic.gba.gob.ar/convocatorias/becas-de-entrenamiento-2026-convocatoria-2025-bentre26/>

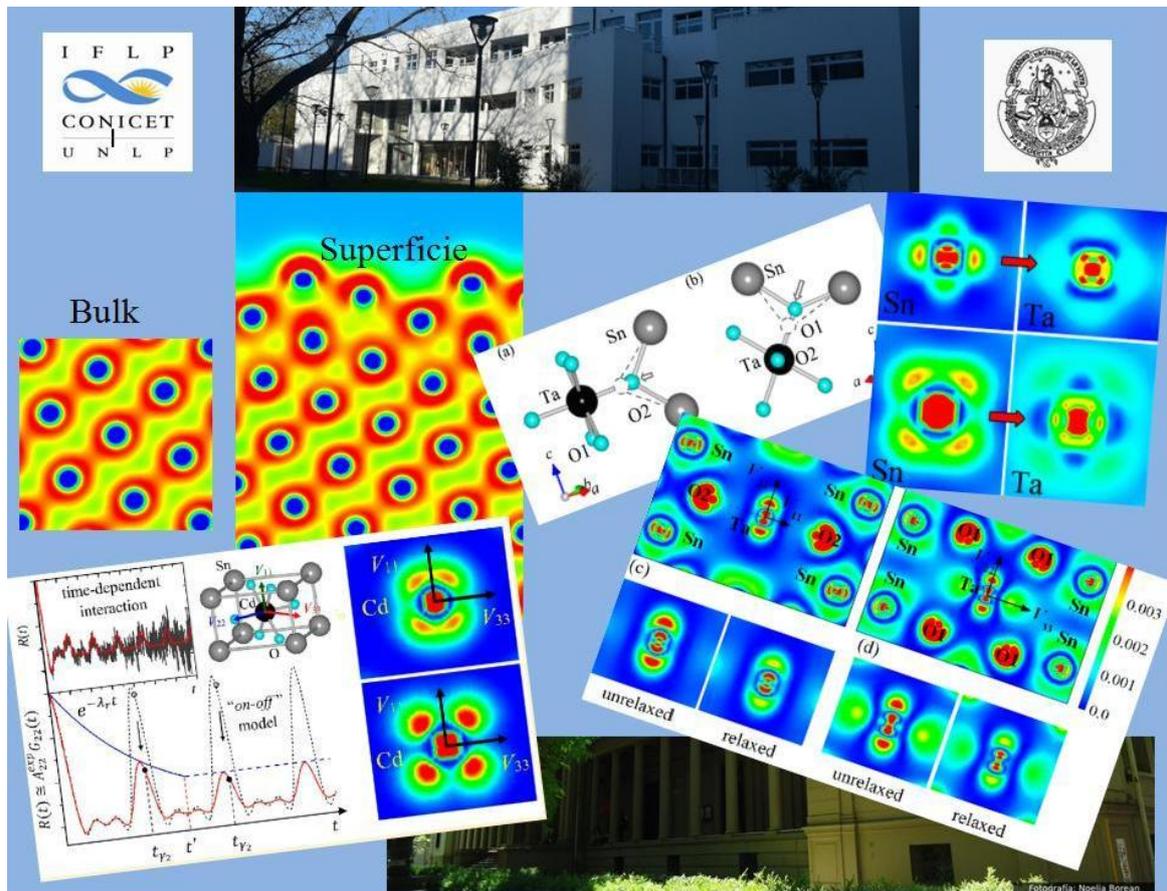
(Bases) <https://www.cic.gba.gob.ar/wp-content/uploads/2025/05/Bases-Becas-Entrenamiento-BENTRE26.pdf>

Los interesados deberán enviar CV y certificado analítico (del SIU) a renteria@fisica.unlp.edu.ar o darriba@fisica.unlp.edu.ar, en lo posible antes del martes 10 de Junio.

Además, 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 [2-10], abordaje aplicado también al estudio de sistemas de menor dimensionalidad, como son las superficies [11]. 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); **Physical Review B** **84**, 239903(E) (2011).

[4] Site localization of Cd impurities in Sapphire”
G. N. Darriba, M. Rentería, H. M. Petrilli and L. C. V. Assali. **Physical Review B** **86**, 075203 (2012).

[5] *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).

[6] Ab Initio Study of Structural, Electronic, and Hyperfine Properties of n-type SnO₂:Ta Semiconductor, Germán N. Darriba, Emiliano L. Muñoz, Leonardo A. Errico, and Mario Rentería. **The Journal of Physical Chemistry C** **118**, 19929-19939 (2014).

[7] Experimental and First-Principles Theoretical Study of Structural and Electronic Properties in Tantalum-Doped In₂O₃ 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).

[8] Experimental TDPAC and Theoretical DFT Study of Structural, Electronic, and Hyperfine Properties in (¹¹¹In→¹¹¹Cd)-Doped SnO₂ 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).

[9] Insights into the aftereffects phenomenon in solids based on DFT and time-differential perturbed γ - γ angular correlation studies in ¹¹¹In (\rightarrow ¹¹¹Cd)-doped tin oxides”
G.N. Darriba, E. L. Muñoz, D. Richard, A. P. Ayala, A. W. Carbonari, H. M. Petrilli, and M. Rentería. **Physical Review B** **105**, 195201 (2022).

[10] Insights on the relevance of DFT+U formalism for strongly correlated Ta d electrons probing the nanoscale in oxides: Combined time differential perturbed angular correlation spectroscopy and ab initio study in ¹⁸¹Hf (\rightarrow ¹⁸¹Ta)-implanted α -Al₂O₃ single crystal”
G.N. Darriba, R. Faccio, P.D. Eversheim and M. Rentería. **Physical Review B** **108**, 245144 (2023).

[11] Electric field gradient study on pure and Cd-doped 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).



QR: enlace a CVs, papers seleccionados, lista completa de publicaciones (1987-2023)

Propuesta para Trabajo de Diploma /Beca de Entrenamiento de la CICpBA (BENTRE26)

El tema de investigación, a la vez formativo en esta etapa, consta básicamente en aprender y aplicar un múltiple abordaje experimental, fenomenológico y de primeros principios al estudio de propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de impurezas metálicas en óxidos semiconductores, principalmente en sistemas *bulk*, para en una etapa doctoral posterior poder extenderlo a superficies y *nanoclusters*. Para ello se estudiarán y emplearán principalmente la espectroscopía nuclear “Time-Differential Perturbed γ - γ Angular Correlation” (TDPAC) y el método *ab initio* “Full-Potential Augmented Plane-Wave plus local orbital” (FP-APW+lo), basado en la Density Functional Theory (DFT). TDPAC permite determinar con extraordinaria precisión la interacción hiperfina entre el momento cuadrupolar nuclear de un átomo-sonda (usualmente una impureza en el material bajo estudio) y el tensor gradiente de campo eléctrico (GCE) en el sitio de la impureza, el cual es altamente sensible a la distribución electrónica subnanoscópica circundante. La descripción altamente confiable de la densidad electrónica alcanzada por estos métodos *ab initio* y, por lo tanto, la excelente predicción del GCE aún en el caso complejo de sitios de impureza (que fue uno de nuestros aportes al estado del arte en estas modelizaciones) permite a través de este doble abordaje teórico-experimental estudiar propiedades intrínsecas de los materiales, aquellas introducidas por la inclusión de las impurezas, y desde un punto de vista más básico entender el origen del GCE en diversos sistemas impureza-huésped diluidos.