

## Talk: Diseño y Caracterización de MXenes 2D de Solución Sólida Basados en Niobio: Exploración de Interacciones Magnéticas para la Espintrónica Mediante Primeros Principios

Friday, 21 November 2025 12:00 (0:30)

### Content

**Abstract:** Este estudio presenta un diseño racional y la caracterización inicial de MXenes 2D de solución sólida basados en Niobio ( $\text{Nb}_{0.8}\text{M}_{0.2}\text{C}_3\text{Tx}$  ( $\text{M} = \text{Sc-Zn}$ )) como una plataforma avanzada para la espintrónica, buscando combinar alta conductividad intrínseca con magnetismo controlable. Empleando cálculos de Primeros Principios (DFT), se establece una metodología rigurosa que incluye la simulación del desorden composicional mediante la aproximación SQS (Special Quasirandom Structure) y el tratamiento de correlaciones electrónicas con DFT+U. Los resultados iniciales confirman la alta polarización de spin de los compuestos y se centran en la exploración de interacciones magnéticas clave para la funcionalidad. La detección de frustración de spin y la subsiguiente cuantificación de la Anisotropía Magnética y la Interacción de Dzyaloshinskii-Moriya (DMI) son cruciales para: a) predecir las Temperaturas de Curie mediante simulaciones de Monte Carlo b) evaluar el potencial de estos sistemas 2D para la estabilización de skyrmiones magnéticos y el desarrollo de dispositivos espintrónicos de baja disipación.

### Summary

**Presenter(s) :** ARRIETA ARAYA, Luis (Universidad de Costa Rica)

**Session Classification :** Plenary talks and Central America research presentations. Chair: Sergio Arguedas