

**ESTUDIO DE PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y TÉRMICAS DE MATERIALES  
2D Y TIPO BULK A TRAVÉS DE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS  
MEDIANTE TEORÍA DEL FUNCIONAL DE LA DENSIDAD Y  
ECUACIÓN DE TRANSPORTE DE BOLTZMANN**

**RENÉ ANTONIO CONTRERAS LÓPEZ  
INGENIERO CIVIL MECÁNICO**

**RESUMEN**

El uso y producción energética ineficiente y contaminante, es sin duda alguna uno de los mayores problemas de la actualidad, construir dispositivos que sean capaces de producir una buena parte de la energía que consumen es posible si se poseen los materiales adecuados. Para este propósito se buscan y diseñan materiales con buenas propiedades termoeléctricas. Este trabajo plantea el análisis mediante primeros principios de dos materiales poco estudiados para este propósito, haciendo uso de teoría del funcional de la densidad y ecuación de transporte de Boltzmann, se estudian las propiedades electrónicas y térmicas del 1H-NbSe<sub>2</sub> y el dióxido de vanadio en su fase metálica. Se emplean entonces diversos softwares como Quantum Espresso, Phonopy, ShengBTE, entre otros. Para lograr este propósito se realizó en primera instancia cálculos de estructura cristalina, para luego pasar al cálculo de bandas electrónicas y finalmente obtener las propiedades termoeléctricas de los materiales. Es importante tener en consideración que los resultados obtenidos mediante estos métodos son aproximaciones, si bien en muchos casos se obtienen resultados muy similares a resultados experimentales, teniendo en consideración las condiciones de borde utilizadas en los cálculos, así como restricciones prácticas, se espera lograr resultados aceptables dentro de las incertezas o tolerancias propias del método empleado. Finalmente se obtuvo para el caso del primer material, una buena simulación, calculando conductividad térmica, calor específico, entre otras. En tanto, la simulación dióxido de vanadio presentó errores en el cálculo de modos vibracionales de la estructura, errores que muy probablemente se deban a las restricciones del cálculo, por ejemplo, en cuanto al tipo de pseudopotencial utilizado.