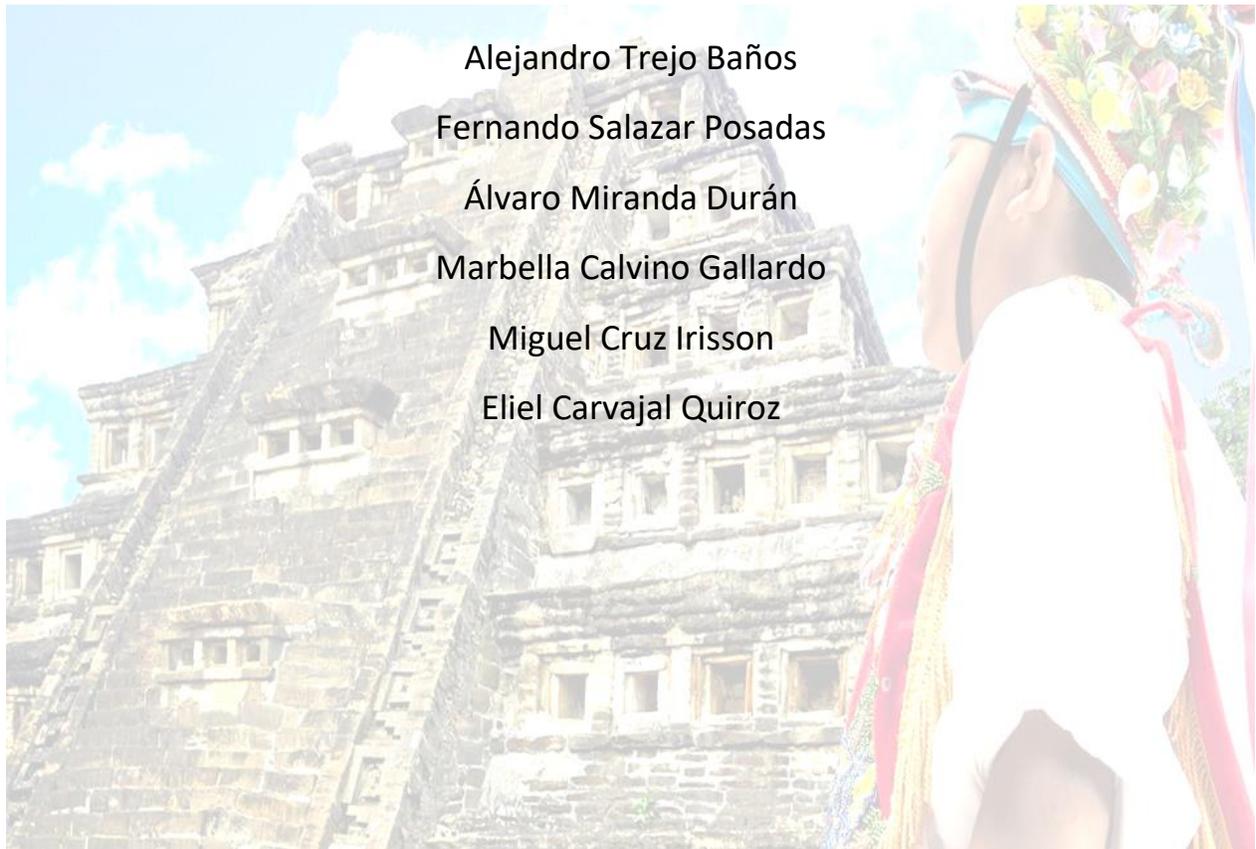
The background features a vibrant, stylized illustration. At the top, there are intricate, swirling patterns in shades of blue and white. Below this, a tall, wooden structure with a central pole and ropes is visible. Several figures are hanging from these ropes, performing a traditional Mayan ceremony. In the background, a large, stepped pyramid with a small temple on top is depicted. The overall scene is set against a bright, colorful sky with soft gradients of blue, yellow, and orange. The ground is a mix of warm tones, suggesting a sandy or stone surface.

Sociedad Mexicana de Física
Reunión Anual de la
División de Estado Sólido 2019

Libro de Resúmenes

Instalaciones del “Parque Takilhsukut”
2 al 4 de mayo de 2019, Papantla, Veracruz

Responsables de la edición



Alejandro Trejo Baños

Fernando Salazar Posadas

Álvaro Miranda Durán

Marbella Calvino Gallardo

Miguel Cruz Irisson

Eliel Carvajal Quiroz

Comité organizador

Grupo de Investigación en Nanociencias de ESIME Culhuacán, IPN

Miguel Cruz Irisson

Fernando Salazar Posadas

Álvaro Miranda Durán

Alejandro Trejo Baños

Marbella Calvino Gallardo

Eliel Carvajal Quiroz

Consejo consultivo

Julio Mendoza Álvarez, CINVESTAV- Cd. de México

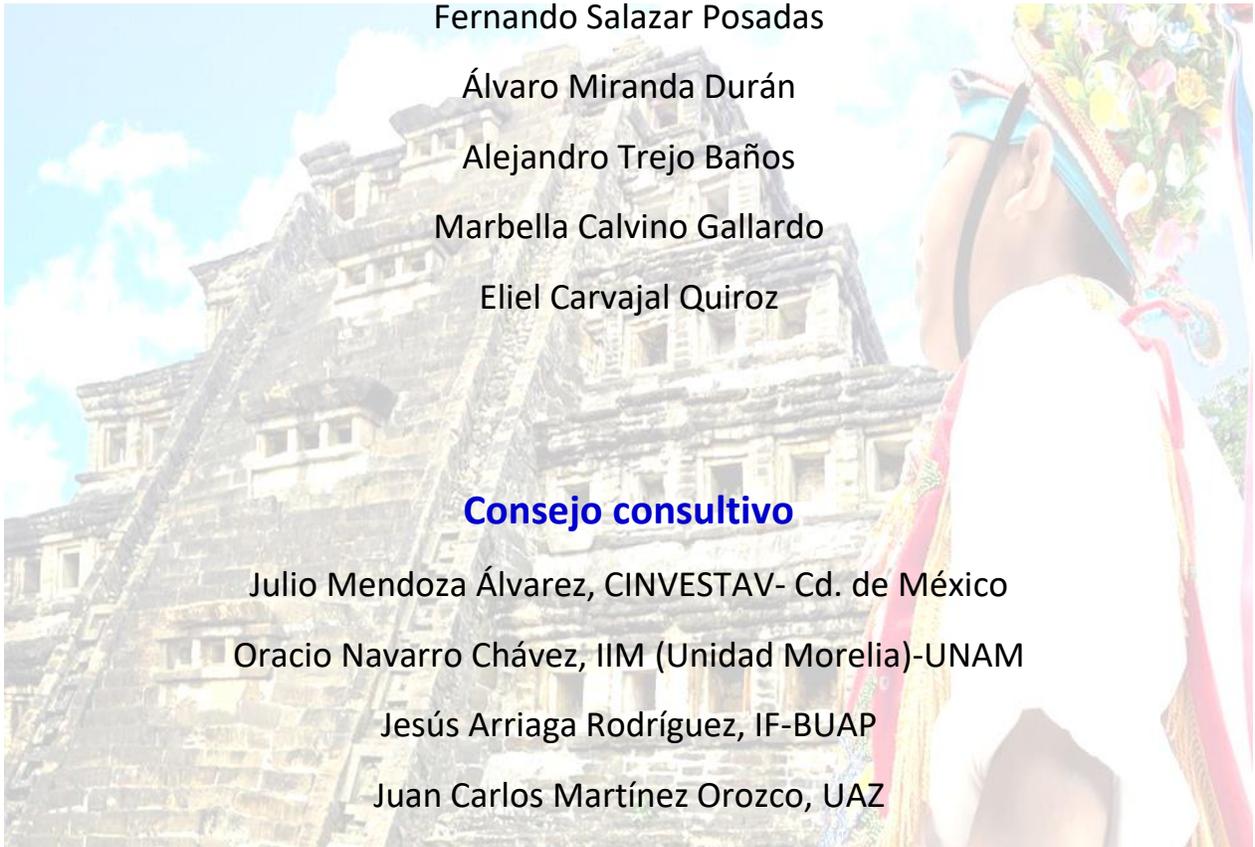
Oracio Navarro Chávez, IIM (Unidad Morelia)-UNAM

Jesús Arriaga Rodríguez, IF-BUAP

Juan Carlos Martínez Orozco, UAZ

Yesenia Arredondo León, ENES (Unidad Morelia)-UNAM

Miguel Cruz Irisson, ESIME-Culhuacan, IPN



Apoyo Financiero



Programa

JUEVES 2 de mayo	
8:30	Transporte Hotel Tajín - Parque Takilhsukut
9:00-9:40	Bienvenida tradicional totonaca
	INAUGURACIÓN
9:40-10:15	Chumin Wang Chen, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM <i>Teoría cuántica de sólidos en espacio real</i>
10:15-10:50	Gerardo García Naumis, Instituto de Física, UNAM <i>Fases cuánticas exóticas en heteroestructuras bidimensionales</i>
10:50-11:10	RECESO Sesión de carteles
11:10-11:45	Vicenta Sánchez Morales, Facultad de Ciencias, UNAM <i>Teorema de convolución en redes no cúbicas</i>
11:45-12:30	Jun Nakamura, <i>Department of Engineering Science, The University of Electro-Communications (UEC-Tokyo), Tokio, Japón</i> <i>Water wettability of graphene</i>
12:30-13:05	Luis Antonio Pérez López, Instituto de Física, UNAM <i>Termodinámica de superconductores no convencionales</i>
13:05-14:00	COMIDA
14:00-14:15	Alessio Palavicini, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM <i>Dispositivos fotónicos de silicio poroso: Diseño multiescala y fabricación</i>
14:15-14:50	Julio Mendoza Álvarez, Departamento de Física, CINVESTAV México <i>Crecimiento y Caracterización de Puntos Cuánticos de InP recubiertos de ZnS y Funcionalizados con Ácidos con Base en Mercaptos (MSA y MPA) para Aplicaciones como Marcadores Biológicos Fluorescentes</i>
14:55	Transporte a zona arqueológica El Tajín
15:00-15:30	Dr. Olaf Jaime Riverón, Monumento Arqueológico El Tajín
15:30-17:00	VISITA ZONA ARQUEOLÓGICA TAJÍN
17:00	FOTOGRAFÍA GRUPAL
17:15	Transporte El Tajín-Hotel
19:00	EVENTO CULTURAL EXPLANADA PALACIO MUNICIPAL



Octava Reunión Anual de la División de Estado Sólido – Sociedad Mexicana de Física

VIERNES 3 de mayo	
8:30	Transporte Hotel-Parque
9:00-9:30	Reconocimiento al Dr. Feliciano Sánchez Sinencio
9:30-10:05	Gregorio Hernández Cocoltzi, <i>Instituto de Física, BUAP</i> <i>Estudios de las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de superficies de semiconductores y nanoestructuras: Estudios de primeros principios</i>
10:05-10:40	Felipe Pérez Rodríguez, <i>Instituto de Física, BUAP</i> <i>Cuantización del amortiguamiento de Landau en películas y nanoestructuras metálicas</i>
10:40-11:10	RECESO / Sesión de carteles
11:10-11:45	Eduardo Barrios Várgas, <i>Facultad de Química, UNAM</i> <i>Electric multipole insulator in a fractal lattice</i>
11:45-12:30	José Miguel García Martín, <i>Instituto de Micro y Nanotecnología, IMN-CNM, CSIC, Madrid, España</i> <i>Recubrimientos nanocolumnares: fabricación sostenible y aplicaciones en biomedicina</i>
12:25-13:05	Thomas Stegmann, <i>Instituto de Ciencias Físicas, UNAM</i> <i>Grafeno deformado como polarizador del espín de valle</i>
13:05-14:00	COMIDA
14:00-14:15	Gonzalo Viramontes Gamboa, <i>Facultad de Ciencias, UMSNH</i> <i>Cinética de reacción química experimental de la calcopirita, CuFeS₂, y su explicación basada en métodos ab initio</i>
14:15-14:30	José Emmanuel Paredes Rocha, <i>Instituto de Ciencias Físicas, UNAM</i> <i>Óptica electrónica en heterouniones de grafeno</i>
14:30-15:05	Gerardo Silverio Contreras Puente, <i>Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN</i> <i>Detección nuclear mediante dispositivos semiconductores de película delgada de CdS/CdTe</i>
15:05-15:20	Ernesto Huipe Domratheva, <i>Instituto de Investigaciones en Materiales-Morelia, UNAM</i> <i>Estudio de la densidad de estados y la función de onda en una red de Penrose</i>
15:20-15:35	Juan Carlos Martínez Orozco, <i>Unidad Académica de Física, UAZ</i> <i>Estudio de propiedades ópticas no lineales en pozos cuánticos escalonados dobles en GaAs/AlGaAs</i>
15:35-16:10	Emmanuel Haro Poniatowski, <i>Departamento de Física, UAM-Iztapalapa</i> <i>Propiedades termo-ópticas de vidrios nanoestructurados</i>
16:10-16:40	RECESO / Sesión de carteles
16:40-16:55	Diosdado Villegas <i>Instituto de Física, BUAP</i> <i>Oscilaciones de Rabi en cavidades acústicas acopladas fabricadas a base de silicio poroso</i>
16:55-17:10	Gabriela Flores Rangel, <i>Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, UASLP</i> <i>Técnica de contraste de reflectancia en el límite óptico de campo cercano: aplicación al Grafeno</i>
17:10-17:45	María del Rocío Nava Lara, <i>Instituto de Energías Renovables, UNAM</i> <i>Ánodos de silicio/carbón para baterías de ion de litio</i>
17:45-18:00	Yonatan Betancur Ocampo, <i>Instituto de Ciencias Físicas, UNAM</i> <i>Ley de reflexión atípica y anti súper tunelamiento de Klein de electrones en uniones np del fosforeno</i>
18:00-18:35	Patricia Salas Casales, <i>Instituto de Física, UNAM</i> <i>Efecto de la variación del número de pares de Cooper sobre las propiedades de los cupratos YBa₂Cu₃O_{6+x} bajodopados</i>
20:00	Evento cultural



Octava Reunión Anual de la División de Estado Sólido – Sociedad Mexicana de Física

SÁBADO 4 de mayo	
8:30	Transporte Hotel-Parque
9:00-9:15	Daisy Yvette Torres Martínez, Facultad Ciencias, UMSNH <i>Síntesis y caracterización óptica, morfológica y estructural de películas delgadas de perovskitas híbridas: $CH_3NH_3PbI_3$</i>
9:15-9:50	Alejandro Kunold Bello, Ciencias Básicas, UAM-A <i>Dinámica del espín electrónico y nuclear en centros paramagnéticos de Ga en GaAsN a través del enfoque de sistema cuántico abierto</i>
9:50-10:05	José Francisco Barrón López, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería, UAEH <i>Estados magnéticos en nanopartículas de YIG (Y3Fe5O12): un enfoque micromagnético</i>
10:05-10:40	Arturo Fernández Madrigal, Instituto de Energías Renovables –UNAM <i>Desarrollo de materiales ópticamente selectivos basados en películas de óxido de aluminio impregnadas con níquel</i>
10:40-11:00	RECESO Sesión de carteles
11:00-12:30	VISITA TALLERES
12:30-13:05	Roberto Escudero Derat, Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM <i>Ru_2Si_2: El orden oculto: características físicas y propiedades no entendidas</i>
13:05-13:20	Bertha Oliva Aguilar Reyes, Instituto de Investigaciones en Materiales-Morelia, UNAM <i>Síntesis de la doble perovskita estequiométrica $Sr_{2-x}MxFe_{1+y}Mo_{1-y}O_6$ (M = La, Nd), propiedades y caracterización magnética</i>
13:20-13:35	Herlinda Montiel Sánchez, Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, UNAM <i>Magnetoimpedancia en sistemas magnetoeléctricos $CoFe_2O_4/BaTiO_3$</i>
13:35-14:10	Jesús Leonardo Heiras Aguirre, Centro de Nanociencias y Nanotecnología UNAM <i>Electrical resistance behavior of a VO_2 Based memristive micro-device $BaTiO_3$</i>
14:10-14:25	Herminio Rebollo Sandoval, Facultad Ciencias, UMSNH <i>Determinación del comportamiento fototérmico de un recubrimiento hecho a base de hollín</i>
14:25-14:40	Amanda Carrillo Castillo, Ingeniería Eléctrica y Computación, UACJ <i>Magnetoimpedancia en sistemas magnetoeléctricos $CoFe_2O_4/BaTiO_3$</i>
14:40	CLAUSURA



Sesión de carteles

No.	Autores / Cartel
3	David Fernández, Fernando Salazar, Álvaro Miranda, Alejandro Trejo, L. A. Pérez, Eliel Carvajal y Miguel Cruz-Irison, Propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres de Ge con Li intersticial y superficial
4	Jaime Eugenio Antonio Pallares, Alejandro Trejo y Miguel Cruz-Irison, Propiedades electrónicas y mecánicas de Monocapas de TiS_2 enfocadas al almacenamiento de energía eléctrica
6	Outmane Oubram, Oracio Navarro Chavez, Eric Jovani Guzmán y Isaac Rodríguez-Vargas, Propiedades del Transporte y termoelectricas del valle-espín con desorden en un superred de Siliceno
7	José Eduardo González, Vicenta Sánchez y Chumin Wang, Transporte termoelectrico en sistemas de ADN
10	Israel González Cortés, Marbella Calvino Gallardo, Alejandro Trejo Baños y Miguel Cruz-Irison, Estudio a primeros principios de las propiedades ópticas y vibracionales de carburo de silicio poroso
12	William Javier Rodríguez Cruz y Alfredo Díaz de Anda, Oscilaciones de Rabi en sistemas elásticos 1D
15	Jesus Arriaga, Martin Ibarias y Arkadii Krokhin Viscosidad Efectiva en un Cristal Fonónico
19	Raúl Isaac López Esquivel, Jose Guadalupe Torres Morales, Jose Guzmán Mendoza y Teodoro Rivera Montalvo, Eficiencia cuántica en compuestos luminiscentes con estructura cubica tipo Perovskita ($XZrO_3$, X=Ba, Sr)
20	Miguel Ángel Hernández Vázquez, Andrés de Luna Bugallo y Rito Daniel Olguín Melo, Estudio teórico de las propiedades estructurales, ópticas y electrónicas de dicalcogenuros de metales de transición
22	Ivan Felipe Bedoya Trujillo, Abdul Mauricio Reyes Usuga, Javier Antonio Montoya Martínez y Oracio Navarro Chávez, Análisis de una monocapa de siliceno vía primeros principios
23	Enrique Francisco Pinzón Escobar, Alejandro Esparza García y Herlinda Montiel Sánchez, Transporte eléctrico en multicapas Vitrovac/Oro/Ferromagnético suave
24	Antonio Del Río De Santiago, Karla Arelly Rodríguez Magdaleno y Juan Carlos Martinez Orozco, Formación de banda intermedia en una superred de pozos tipo delta de AlGaAs/GaAs
25	Eric Jovani Guzmán, Outmane Oubram, Oracio Navarro Chávez y Isaac Rodríguez Vargas, Estudio de las propiedades termoelectricas en superredes aperiódicas construidas a base de siliceno
26	Jose Guadalupe Rojas Briseño, Juan Carlos Martínez Orozco y Miguel Eduardo Mora Ramos, Cálculo de excitones en pozos cuánticos basados en nitruros con estructura zinc blenda
27	José Luis Rosas, Jesús Alberto León-Flores, Eliel Carvajal Quiroz, Raúl Escamilla y Martín Romero, Estructura cristalina del sistema $Sr_2FeMo_{1-x}Nb_xO_6$
28	Alma Lorena Marcos Viquez, Miguel Cruz Irison y Luis Antonio Pérez López, Propiedades mecánicas y electrónicas de nanoalambres de carburo de estaño
29	Everardo Lopez Moreno, M. Herlinda Montiel Sanchez y Guillermo Alvarez Lucio, Propiedades magnéticas y magnetodieléctricas de Ferrita de cobalto ($CoFe_2O_4$)
30	Eduardo Zúñiga Rivera, Dora Patricia Fernández Jiménez, Fernando Salazar Posadas y Eliel Carvajal Quiroz, Perovskita haluro de germanio $CH_3NH_3GeI_3$
32	Rebeca González Reyes, Juan Carlos Martínez Orozco y Alejandro Puga Candelas, Propiedades optoelectrónicas de un pozo doble asimétrico de AlGaAs/GaAs en presencia de un campo electromagnético
35	Humberto Noverola-Gamas, Luis Manuel Gaggero Sager y Outmane Oubram, Coeficiente de absorción en un pozo cuántico delta doble dopado tipo n
37	José Eduardo Santana, Francisco de Santiago, Álvaro Miranda, Alejandro Trejo, Rubén Vázquez-Medina, Luis Antonio Pérez y Miguel Cruz-Irison, Detección de gases tóxicos a través de nanoestructuras de silicio
38	Héctor Muñoz González, Gerardo A. Galicia y Álvaro Miranda Durán, Propiedades electrónicas de la monocapa de carburo de germanio decorada con átomos alcalinos

Sesión de carteles



Octava Reunión Anual de la División de Estado Sólido – Sociedad Mexicana de Física

No.	Autores / Cartel
39	Ángel D. de la Merced, Francisco de Santiago, Álvaro Miranda y Fernando Salazar, Nanoalambres de diamante como sensores de moléculas de CO
40	Lorenzo Antonio López Hernández, Francisco de Santiago y Alvaro Miranda, Propiedades magnéticas de una monocapa de ZnO dopada con átomos de B, N y vacancias
41	Belen Eugenia Maldonado Villa, Karla Arely Rodríguez Magdaleno y Juan Carlos Martínez Orozco, Efecto de la presión hidrostática y del campo eléctrico en el coeficiente de absorción en pozos cuánticos dobles asimétricos en AlGaAs/GaAs
42	Antony Francisco López Sánchez, Ricardo Bermeo, Alejandro Trejo, Fernando Salazar y Miguel Cruz-Irisson, Análisis de la estabilidad dinámica y las propiedades electrónicas de monocapas de sulfuro de cadmio
43	Andrei Gorbachev, Juan Adrian Galvan Montalvo, Francisco De Anda y Viatcheslav Michournyi, Usage of the CALPHAD method to estimate the thermodynamic stability of interfaces between lattice-matched Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y} epitaxial layers grown by LPE on GaAs and InP substrates
44	Francisco De Santiago Varela, Álvaro Miranda Durán, Alejandro Trejo Baños, Fernando Salazar, Eliel Carvajal, Miguel Cruz-Irisson y Luis Antonio Pérez, Efectos del confinamiento cuántico en las propiedades de detección de gases tóxicos de nanoalambres de Si
45	Francisco De Santiago Varela, Álvaro Miranda Durán, Alejandro Trejo Baños, Fernando Salazar, Eliel Carvajal, Luis Antonio Pérez y Miguel Cruz-Irisson, Detección de monóxido de carbono por nanoalambres de Si dopados con B, Al o Ga
47	Jimena Pérez González, Antonio Del Río De Santiago y Juan Carlos Martínez Orozco, Efecto de la radiación laser intensa en las propiedades electrónicas de pozos cuánticos asimétricos dobles de GaAs/AlGaAs
48	Akari Narayama Sosa, Alejandro Trejo y Miguel Cruz-Irisson, Efecto del litio en los modos ópticos de vibración y en las propiedades electrónicas en nanoestructuras de Ge
49	Francisco de Santiago, Akari Narayama Sosa y Álvaro Miranda Almacenamiento de hidrógeno en germaneno decorado con metales alcalinos
50	Alan Macias, Akari Narayama Sosa, Alejandro Trejo y Miguel Cruz-Irisson, Propiedades electrónicas del germanio poroso como ánodo en baterías de Li
51	Facundo Ruiz, Claudio Adrián Ruiz-Torres, Martha Eugenia Compeán-Jasso, Nereyda Niño-Martínez, Gabriel Alejandro Martínez-Castañón y Yuhoon Hwang, Método para la preparación de hierro nanométrico cero-valente, estable en aire, y uniformemente distribuido
53	Oscar Ruiz, Luis Felipe Lastras, Edgar Cerda, Gabriela Flores, Raul Balderas, Lilitiana Guevara, Jorge Ortega, Alfonso Lastras, Klaus Biermann y Paulo Santos, Estudio de Excitones Indirectos y Triones en pozos cuanticos asimetricos acoplados
55	Lucía Guadalupe Arellano Sartorius y Jun Nakamura, Actividad catalítica del grafeno dopado con boro para reacciones de reducción de oxígeno
56	Lucía Guadalupe Arellano Sartorius, Francisco De Santiago Varela y Álvaro Miranda Durán, Monocapa de carburo de silicio decorada con metales para almacenamiento de H₂
57	Iván De Jesús Ornelas Cruz, Raúl Oviedo Roa, Alejandro Trejo Baños y Fernando Salazar Posadas, Estudio a primeros principios de la perovskita CsSn_{1-3-x}Br_x para aplicación fotovoltaica
58	Israel González, Akari Sosa, Alejandro Trejo, Marbella Calvino, Álvaro Miranda y Miguel Cruz-Irisson, Efecto del litio en las propiedades electrónicas del silicio poroso aplicado a baterías
59	Israel González, Francisco de Santiago, Lucía Arellano, Álvaro Miranda, Alejandro Trejo y Miguel Cruz-Irisson, Almacenamiento de H₂ en silicio poroso funcionalizado con Li, Pd y Be
61	Jonathan Galvan Gamboa, Jesús Ramírez Solano y Alejandro Trejo, Efectos de la anisotropía en las propiedades electrónicas de nanoalambres de diamante con defectos vacancia-nitrógeno
62	Horacio Espinosa, Ivan De Jesus Ornelas Cruz y Alejandro Trejo Baños, Análisis dinámico y propiedades electrónicas de la perovskita CH₃NH₃CaX₃
74	Fernando Salazar, Álvaro Miranda, Alejandro Trejo, Luis A. Pérez y M Cruz-Irisson, Estudio teórico de las propiedades mecánicas y electrónicas de nanoalambres de Si con Li intersticial



Mensaje de bienvenida

La física del estado sólido, es sin duda una disciplina que ha permitido un desarrollo tecnológico importante en las últimas décadas. La comunidad científica en materia condensada de nuestro país ha mostrado capacidad para generar conocimiento de frontera y el nivel de especialización se reconoce a nivel internacional, así como la formación de nuevas generaciones de científicos que continuarán las investigaciones con ideas y metodologías originales. En esta octava reunión anual de la División de Estado Sólido de la Sociedad Mexicana de Física (DES-SMF) hay una importante participación de estudiantes, jóvenes investigadores, y experimentados científicos. Hoy en día, la ciencia requiere del trabajo multidisciplinario y la física del estado sólido es una de las áreas donde se iniciaron las primeras colaboraciones para el desarrollo de una gran variedad de aplicaciones tecnológicas. Es importante señalar, que el **Dr. Feliciano Sánchez Sinencio**, ingeniero en comunicaciones eléctricas y electrónicas egresado de la ESIME-Zacateco del IPN, fue pionero en impulsar el trabajo multidisciplinario en México, su visión y pasión por la física experimental y aplicada le permitió realizar una multitud de aportaciones al estudio de los semiconductores y aislantes, así como la formación de recursos humanos, por lo que en esta ocasión, es el galardonado de la reunión. Por otro lado, esperamos que este encuentro nos permita intercambiar puntos de vista que enriquezcan las investigaciones y se inicien nuevas colaboraciones que fortalezcan a la comunidad científica nacional.

En esta ocasión nos reunimos en el Tajín, principal ciudad de la cultura Totónaca (también conocida como Tutunacú: pueblo de tres corazones). A pesar de tantos años de marginación, este pueblo pacífico de gran corazón ha realizado grandes aportaciones, por ejemplo, en la arquitectura y cosmovisión como se demuestra en esta ciudad maravillosa dedicada al dios del rayo y del trueno. A pesar de la conquista y el abandono social ha logrado preservar su lengua, gastronomía y sus tradiciones. Finalmente, agradecemos el apoyo y entusiasmo de los participantes nacionales e internacionales, así como a todas las dependencias de los gobiernos municipal y estatal.

¡¡Bienvenidos a la región del Totonacapan y a Papantla, la ciudad que perfuma al mundo!!

Miguel Cruz Irisson
Presidente de la DES-SMF
2019-2020



Índice

Conferencias Invitadas internacionales

<i>Recubrimientos nanocolumnares: fabricación sostenible y aplicaciones en biomedicina</i> Dr. José Miguel García-Martín.....	1
<i>Water wettability of graphene</i> Jun Nakamura.....	2

Conferencias Invitadas Nacionales

<i>Grafeno deformado como polarizador del espín de valle</i> Thomas Stegmann, Nikodem Szpak.....	5
<i>Efecto de la variación del número de pares de Cooper sobre las propiedades de los cupratos $YBa_2Cu_3O_{6+x}$ bajodopados</i> Patricia Salas y M. A. Solís.....	7
<i>Cuantización del amortiguamiento de Landau en películas y nanoestructuras metálicas</i> F. Pérez-Rodríguez, S. G. Castillo-López, N. M. Makarov.....	8
<i>Ánodos de silicio/carbón para baterías de ion de litio</i> María del Rocío Nava Lara y Jazael Gómez Ocampo.....	10
<i>Teoría cuántica de sólidos en espacio real</i> Chumin Wang.....	11
<i>Electric multipole insulator in a fractal lattice</i> Marco Antonio Díaz Villarreal, José Eduardo Barrios Vargas.....	12
<i>Detección nuclear mediante dispositivos semiconductores de película delgada de CdS/CdTe</i> Gerardo Contreras Puente.....	13
<i>Teorema de convolución en redes no cúbicas</i> Vicenta Sánchez.....	14
<i>Estudios de las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de superficies de semiconductores y nanoestructuras: Estudios de primeros principios</i> Gregorio H. Coccoletzi.....	15
<i>Uru_2Si_2: El orden oculto: características físicas y propiedades no entendidas</i> Roberto Escudero-Derat.....	16

<i>Dinámica del espín electrónico y nuclear en centros paramagnéticos de Ga en GaAsN a través del enfoque de sistema cuántico abierto</i> Alejandro Kunold Bello	17
<i>Propiedades termo-ópticas de vidrios nanoestructurados</i> Emmanuel Haro-Poniatowski	18
<i>Electrical resistance behavior of a VO₂ Based memristive micro-device</i> J. Heiras, A. Mamian, J. J. Realpe, G. Bolaños	19
<i>Termodinámica de superconductores no convencionales</i> Luis A. Pérez	20
<i>Fases cuánticas exóticas en heteroestructuras bidimensionales</i> Gerardo G. Naumis	21
<i>Crecimiento y Caracterización de Puntos Cuánticos de InP recubiertos de ZnS y Funcionalizados con Ácidos con Base en Mercaptos (MSA y MPA) para Aplicaciones como Marcadores Biológicos Fluorescentes</i> Daladier A. Granada, Fabiola Vázquez, J. Saúl Arias, María Lucero Gómez, Juan Pedro Luna, Patricia Rodríguez, Julio G. Mendoza.....	22
<i>Desarrollo de materiales ópticamente selectivos basados en películas de óxido de aluminio impregnadas con níquel.</i> A.M. Fernández	23
<i>La ciudad de El Tajín durante la Época Prehispánica.</i> Olaf Jaime Riverón.....	24

Sesiones Orales

<i>Materiales activos desarrollados por métodos de vía húmeda para su aplicación en dispositivos semiconductores</i> Adriana García, Joam M. Rincón, Manuel A. Chairez, Mayra A. Hernández, Jessica Lillo, José S. Arellano, Laura A. Carrasco, María de la Luz Mota, Amanda Carrillo	26
<i>Óptica electrónica en heterouniones de grafeno</i> Emmanuel Paredes-Rocha, Thomas Stegmann	28
<i>Síntesis y caracterización óptica, morfológica y estructural de películas delgadas de perovskitas híbridas: CH₃NH₃PbI₃</i> D.Y. Torres Martínez, B. Aguilar, O. Navarro, A. Valdespino.....	29
<i>Estados magnéticos en nanopartículas de YIG (Y₃Fe₅O₁₂): un enfoque micromagnético</i> J.F. Barrón-López, A.M. Bolarín Miró, F. Sánchez-De Jesús, G. Alvarez y H. Montiel	30

<i>Ley de reflexión atípica y anti súper tunelamiento de Klein de electrones en uniones np del fosforeno</i>	
<i>Y. Betancur-Ocampo, T. Stegmann, y F. Leyvraz</i>	32
<i>Cinética de reacción química experimental de la calcopirita, CuFeS₂, y su explicación basada en métodos ab initio</i>	
<i>J. A. Pérez Ruiz, A. Reyes Usuga, L. A. Ibarra Bracamontes, y G. Viramontes Gamboa</i>	34
<i>Determinación del comportamiento fototérmico de un recubrimiento hecho a base de hollín</i>	
<i>H. Rebollo Sandoval, L. M. Hernández Ramírez, G. Viramontes Gamboa, M. C. Peña Gomar, D. Cardona Ramírez</i>	35
<i>Estudio de la densidad de estados y la función de onda en una red de Penrose</i>	
<i>E. Huipe-Domratheva^{1,2*}, O. Navarro²</i>	36
<i>Oscilaciones de Rabi en cavidades acústicas acopladas fabricadas a base de silicio poroso</i>	
<i>Zorayda Lazcano, Diosdado Villegas, y Jesús Arriaga</i>	37
<i>Síntesis de la doble perovskita estequiométrica Sr_{2-x}MxFe_{1+y}Mo_{1-y}O₆ (M = La, Nd), propiedades y caracterización magnética</i>	
<i>B. Aguilar, T. Soto, Y. Barrera, J. De La Torre, O. Navarro</i>	39
<i>Estudio de propiedades ópticas no lineales en pozos cuánticos escalonados dobles en GaAs/AlGaAs</i>	
<i>J. C. Martínez-Orozco, K. A. Rodríguez-Magdaleno, F. Ungan</i>	40
<i>Dispositivos fotónicos de silicio poroso: Diseño multiescala y fabricación</i>	
<i>Alessio Palavicini y Chumin Wang</i>	41
<i>Magnetoimpedancia en sistemas magnetoeléctricos CoFe₂O₄/BaTiO₃</i>	
<i>H. Montiel, E. López-Moreno, y G. Alvarez</i>	42
<i>Técnica de contraste de reflectancia en el límite óptico de campo cercano: aplicación al Grafeno</i>	
<i>G. Flores, L.F. Lastras, D. Medina, O. Ruiz, R. Castro, R.E. Balderas, M. del P. Morales, J. Ortega, A. Lastras y M. Losurdo</i>	43

Sesiones de Carteles

<i>Propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres de Ge con Li intersticial y superficial</i>	
<i>D. Fernández, F. Salazar, A. Miranda, A. Trejo, L. A. Pérez, E. Carvajal y M. Cruz-Irisson</i>	45
<i>Propiedades electrónicas y mecánicas de Monocapas de TiS₂ enfocadas al almacenamiento de energía eléctrica</i>	
<i>J.E. Antonio, A. Trejo y M. Cruz-Irisson</i>	47

<i>Propiedades del Transporte y termoeléctricas del valle-espín con desorden en un superred de Siliceno</i> O. Oubram, O. Navarro, E.J. Guzmán, I. Rodríguez-Vargas ⁴	49
<i>Transporte termoeléctrico en sistemas de ADN</i> J. E. González, V. Sánchez and C. Wang	50
<i>Estudio a primeros principios de las propiedades ópticas y vibracionales de carburo de silicio poroso</i> I. González, M. Calvino, A. Trejo, M. Cruz-Irisson	52
<i>Oscilaciones de Rabi en sistemas elásticos 1D</i> W.J. Rodríguez Cruz, A. Díaz de Anda	53
<i>Viscosidad Efectiva en un Cristal Fonónico</i> M. A. Ibarias, J. Arriaga y A. A. Krokhin.....	54
<i>Eficiencia cuántica en compuestos luminiscentes con estructura cubica tipo Perovskita (XZrO₃, X=Ba, Sr)</i> R. I. López Esquivel, J. G. Torres Morales, J. Guzmán Mendoza, T. Rivera Montalvo	56
<i>Estudio teórico de las propiedades estructurales, ópticas y electrónicas de dicalcogenuros de metales de transición</i> Miguel A. Hernández Vázquez, Andrés de Luna Bugallo y R. Daniel Olguín Melo	57
<i>Análisis de una monocapa de siliceno vía primeros principios</i> I. F. Bedoya, A. M. Reyes, J. A. Montoya y O. Navarro.....	58
<i>Transporte eléctrico en multicapas Vitrovac/Oro/Ferromagnético suave</i> Enrique Francisco Pinzón Escobar, A. Esparza García y Herlinda Montiel.....	59
<i>Formación de banda intermedia en una superred de pozos tipo delta de AlGaAs/GaAs</i> A. Del Río-De Santiago, K. A. Rodríguez-Magdaleno, J. C. Martínez-Orozco.	60
<i>Estudio de las propiedades termoeléctricas en superredes aperiódicas construidas a base de siliceno</i> E.J. Guzmán, O. Oubram, O. Navarro y I. Rodríguez-Vargas.....	61
<i>Cálculo de excitones en pozos cuánticos basados en nitruros con estructura zinc blenda</i> J. G. Rojas-Briseño, J. C. Martínez-Orozco y M. E. Mora-Ramos	62
<i>Estructura cristalina del sistema Sr₂FeMo_{1-x}Nb_xO₆</i> José Luis Rosas, Jesús Alberto León, Eliel Carvajal, Raúl Escamilla y Martín Romero	63
<i>Propiedades mecánicas y electrónicas de nanoalambres de carburo de estaño</i> Alma L. Marcos-Viquez, Miguel Cruz-Irisson y Luis A. Pérez.....	65

<i>Propiedades magnéticas y magnetodiéлектриcas de Ferrita de cobalto (CoFe₂O₄)</i> E. López Moreno, H. Montiel y G. Álvarez	66
<i>Perovskita haluro de germanio CH₃NH₃GeI₃</i> E. Zúñiga, D. P. Fernández, F. Salazar, E. Carvajal.....	68
<i>Heteroestructuras nanométricas de Si/LaTiO₃</i> J. M. Cervates, E. Zúñiga, R. Oviedo-Roa, E. Carvajal, E. Alva	70
<i>Propiedades optoelectrónicas de un pozo doble asimétrico de AlGaAs/GaAs en presencia de un campo electromagnético</i> R. González-Reyes, A. Puga-Candelas, J. C. Martínez-Orozco.....	72
<i>Coefficiente de absorción en un pozo cuántico delta doble dopado tipo n</i> H Noverola-Gamas, LM Gaggero Sager y O Oubram.....	73
<i>Detección de gases tóxicos a través de nanoestructuras de silicio</i> José Eduardo Santana, Francisco de Santiago, Álvaro Miranda, et al.	74
<i>Propiedades electrónicas de la monocapa de carburo de germanio decorada con átomos alcalinos</i> Héctor Muñoz, Gerardo A. Galicia, Álvaro Miranda	76
<i>Nanoalambres de diamante como sensores de moléculas de CO</i> Ángel Daniel de la Merced, Francisco de Santiago, Álvaro Miranda y Fernando Salazar.....	78
<i>Propiedades magnéticas de una monocapa de ZnO dopada con átomos de B, N y vacancias</i> Lorenzo A. López, Francisco de Santiago, Álvaro Miranda.....	80
<i>Estudio de propiedades ópticas no lineales en pozos cuánticos escalonados dobles en GaAs/AlGaAs</i> B. E. Maldonado-Villa, K. A. Rodríguez-Magdaleno, J. C. Martínez-Orozco.....	82
<i>Análisis de la estabilidad dinámica y las propiedades electrónicas de monocapas de sulfuro de cadmio</i> Antony F. López, Ricardo Bermeo, Alejandro Trejo, Fernando Salazar, Miguel Cruz-Irisson.	83
<i>Usage of the CALPHAD method to estimate the thermodynamic stability of interfaces between lattice-matched Ga_xIn_{1-x}As_yP_{1-y} epitaxial layers grown by LPE on GaAs and InP substrates</i> Gorbachev A. Yu, Galván Montalvo J. A., De Anda F., Michournyi V. A.	84
<i>Efectos del confinamiento cuántico en las propiedades de detección de gases tóxicos de nanoalambres de Si</i> Francisco de Santiago, Álvaro Miranda, Alejandro Trejo, Fernando Salazar ¹ , Eliel Carvajal, Miguel Cruz-Irisson y Luis A. Pérez ²	85

<i>Detección de monóxido de carbono por nanoalambres de Si dopados con B, Al o Ga</i> Francisco de Santiago, Álvaro Miranda, Alejandro Trejo, Fernando Salazar, Eliel Carvajal, Luis A. Pérez, and Miguel Cruz Irisson.....	87
<i>Efecto de la radiación laser intensa en las propiedades electrónicas de pozos cuánticos asimétricos dobles de GaAs/AlGaAs</i> J. Pérez-González, A. Del Río-De Santiago, J. C. Martínez-Orozco.....	89
<i>Efecto del litio en los modos ópticos de vibración y en las propiedades electrónicas en nanoestructuras de Ge</i> Akari Narayama Sosa, Alejandro Trejo y Miguel Cruz-Irisson	90
<i>Almacenamiento de hidrógeno en germaneno decorado con metales alcalinos</i> Francisco de Santiago, Akari Narayama Sosa, Álvaro Miranda.....	92
<i>Propiedades electrónicas del germanio poroso como ánodo en baterías de Li</i> Alan Macias-González, Akari Narayama Sosa, Alejandro Trejo, Miguel Cruz-Irisson	94
<i>Método para la preparación de hierro nanométrico cero-valente, estable en aire, y uniformemente distribuido</i> Ruiz-Torres Claudio, Compeán-Jasso Martha Eugenia, Niño-Martínez Nereyda, Martínez-Castañón Gabriel Alejandro, y Ruiz Facundo.....	95
<i>Estudio de Excitones Indirectos y Triones en pozos cuánticos asimétricos acoplados</i> O. Ruiz, L.F. Lastras, E.A. Cerda, G. Flores, R.E. Balderas, L.E. Guevara, J. Ortega, A. Lastras, K. Biermann y P. V. Santos.	97
<i>Actividad catalítica del grafeno dopado con boro para reacciones de reducción de oxígeno</i> Lucía G. Arellano y Jun Nakamura	98
<i>Monocapa de carburo de silicio decorada con metales para almacenamiento de H₂</i> Lucía G. Arellano, Francisco de Santiago, Álvaro Miranda	99
<i>Estudio a primeros principios de la perovskita CsSnI_{3-x}Br_x para aplicación fotovoltaica</i> I. Ornelas-Cruz, R. Oviedo-Roa, A. Trejo-Baños, F. Salazar	100
<i>Efecto del litio en las propiedades electrónicas del silicio poroso aplicado a baterías</i> Israel González, Akari N. Sosa, Alejandro Trejo, et al.	102
<i>Almacenamiento de H₂ en silicio poroso funcionalizado con Li, Pd y Be</i> Israel González, Francisco de Santiago, Lucía G. Arellano, et al.	104
<i>Efectos de la anisotropía en las propiedades electrónicas de nanoalambres de diamante con defectos vacancia-nitrógeno</i> Jonathan Galvan Gamboa, Jesús Ramírez Solano y Alejandro Trejo Baños	106

<i>Análisis dinámico y propiedades electrónicas de la perovskita $CH_3NH_3CaBr_3$</i> <i>H. Espinosa, I. Ornelas, A. Trejo, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson.....</i>	<i>108</i>
<i>Estudio teórico de las propiedades mecánicas y electrónicas de nanoalambres de Si con Li intersticial</i> <i>F. Salazar, A. Miranda, A. Trejo, L. A. Pérez y M. Cruz-Irisson</i>	<i>109</i>
<i>Efectos de la litación en las propiedades estructurales y electrónicas de nanoalambres de Si como material anódico</i> <i>Francisco de Santiago, José E. González, Álvaro Miranda, et al.</i>	<i>111</i>
<i>Estudio de las propiedades electrónicas y vibracionales del pSi como material anódico para baterías de Li-ion</i> <i>Ismael Machorro, Israel González, Alejandro Trejo y Miguel Cruz-Irisson.....</i>	<i>113</i>
<i>Estudio teórico de las propiedades electrónicas y mecánicas del carburo de silicio poroso halogenado.</i> <i>K. Madrigal, A. Ángeles, M. Calvino, y Alejandro Trejo</i>	<i>115</i>
<i>Estudio de las propiedades ópticas y térmicas de nanocristales semiconductores de InP coloidales.</i> <i>Juan José Ortiz-Estrada, J. Martín Yañez-Limón, M. Lucero Gómez-Herrera, Daladier A. Granada-Ramírez³, Julio G. Mendoza-Alvarez</i>	<i>116</i>

Conferencias Invitadas internacionales

Recubrimientos nanocolumnares: fabricación sostenible y aplicaciones en biomedicina

Dr. José Miguel García-Martín*

Instituto de Micro y Nanotecnología, IMN-CSIC, Tres Cantos (Madrid), España

*Autor de correspondencia: jmiguel@imm.cnm.csic.es

Palabras clave: Recubrimientos nanocolumnares, Sputtering, Biomedicina

En esta conferencia mostraré cómo se fabrican recubrimientos nanocolumnares mediante deposición oblicua con pulverización catódica de tipo magnetrón (magnetron sputtering). Esta técnica es energéticamente eficiente y respetuosa con el medio ambiente, ya que se realiza a temperatura ambiente en un solo paso y no involucra productos químicos (por lo tanto, sin problemas de reciclaje). Se verá que la formación de nanocolumnas es el resultado de los efectos de sombreado atómico cuando los átomos llegan a la superficie a lo largo de una dirección inclinada. Dependiendo de diversos parámetros (como la presión del gas, el ángulo de inclinación del sustrato y la rotación del mismo), la estructura nanocolumnar se puede controlar, dando lugar a diferentes propiedades. Hemos desarrollado un modelo para explicar las diferentes morfologías obtenidas, así como la tasa de deposición [1-4]. A continuación, mostraré dos aplicaciones en biomedicina de estos recubrimientos nanocolumnares. Por un lado, para el desarrollo de implantes metálicos con propiedades antibacterianas, ya que la fuerte corrugación en la nanoescala dificulta la adhesión de las bacterias e impide la formación de biofilm [5]; además, en combinación con otras nanopartículas pueden tenerse efectos bactericidas [6]. Por otro, como sustratos para espectroscopía Raman mejorada en la superficie (SERS), puesto que las propiedades plasmónicas de las nanocolumnas permiten detectar la presencia de biomoléculas con baja concentración [7,8].

Referencias

- [1] J.M. García-Martín et al., Appl. Phys. Lett. **97**, 173103 (2010)
- [2] R. Alvarez et al., Nanotechnology **24**, 045604 (2013)
- [3] R. Alvarez et al., Plasma Process. Polym. **11**, 571 (2014)
- [4] R. Alvarez et al., J. Phys. D: Appl. Phys. **49**, 045303 (2016).
- [5] I. Izquierdo-Barba et al., Acta Biomaterialia **15**, 20 (2015).
- [6] D. Medina-Cruz et al., Nanomed.-Nanotechnol. Biol. Med. **17**, 36 (2019)
- [7] A. Vitrey et al., Beilstein J. Nanotechnol. **8**, 434 (2017)
- [8] P. Díaz-Núñez et al., submitted (2018)

Water wettability of graphene

Jun Nakamura*

The University of Electro-Communications (UEC-Tokyo), Tokyo, Japan

*Autor de correspondencia: junj@ee.uec.ac.jp

Palabras clave: Graphene, Molecular dynamics, Wettability

While graphite is known as hydrophobic material, recent studies have revealed that pristine graphitic surfaces are more likely to be hydrophilic. Hydrophobic/hydrophilic nature is closely related to wettability of surfaces. One of the characteristic measures of wettability is a contact angle that is the angle of the edges of a water droplet placed on target surfaces. It has been reported that the contact angle of water on graphite surfaces decreases as hydrocarbons on the surface are removed [1,2]. The contact angle estimated by molecular dynamics (MD) simulations, however, varies depending on a choice of the parameters of interaction potentials between a water molecule and graphitic surfaces [3]. On the other hand, water molecules have been confirmed to form layered structures on a graphene surface [4] and on the wall of carbon nanotubes [5]. But, the wettability of pristine graphene surfaces remains unsettled.

To investigate the water wettability of graphitic surfaces, we use molecular dynamics simulations of water molecules on the surface of a single graphene layer at room temperature [6]. The results indicate that a water droplet spreads over the entire surface and that a double-layer structure of water molecules forms on the surface, which means that wetting of graphitic surfaces is possible, but only by two layers of water molecules (Fig.1). No further water layers can cohere to the double-layer structure, but the formation of three-dimensional clusters of liquid water is confirmed. The surface of the double-layer structure acts as a hydrophobic surface. Such peculiar behavior of water molecules can be reasonably explained by the formation of hydrogen bonds: The hydrogen bonds of the interfacial water molecules form between the first two layers and also within each layer. This hydrogen-bond network is confined within the double layer, which means that no "dangling hydrogen bonds" appear on the surface of the double-layer structure. This formation of hydrogen bonds stabilizes the double-layer structure and makes its surface hydrophobic. Thus, the numerical simulations indicate that a graphene surface is perfectly wettable on the atomic scale and becomes hydrophobic once it is covered by this double layer of water molecules.

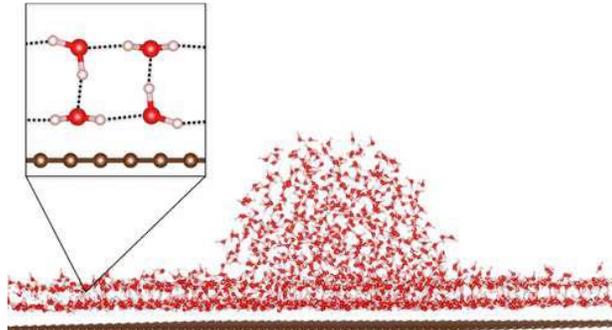


Fig. 1 Snapshots of MD simulations of a water droplet falling onto a graphene surface. The inset shows the schematic view of the double-layered structure of water molecules.

References:

- [1] Z. Li et al., *Nat. Mater.* **12**, 925 (2013)
- [2] A. Kozbial et al., *Carbon* **74**, 218 (2014)
- [3] T. Werder, J. H. Walther, R. L. Jaffe, T. Halicioglu, and P. Koumoutsakos, *J. Chem. Phys. B* **107**, 1345 (2003)
- [4] Y. Maekawa, K. Sasaoka, and T. Yamamoto, *Jpn. J. Appl. Phys.* **57**, 035102 (2018)
- [5] Y. Homma, S. Chiashi, T. Yamamoto, K. Kono, D. Matsumoto, J. Shitaba, and S. Sato, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 157402 (2013)
- [6] A. Akaishi, T. Yonemaru, and J. Nakamura, *ACS Omega* **2**, 2184 (2017)

Conferencias Invitadas Nacionales

Grafeno deformado como polarizador del espín de valle

Thomas Stegmann^{1*}, Nikodem Szpak²

¹Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, Mexico

²Fakultät für Physik, Universität Duisburg-Essen, Duisburg, Germany

*Autor de correspondencia: stegmann@icf.unam.mx

Palabras clave: grafeno deformado, valletrónica

Una de las características excepcionales del grafeno es el hecho de que los electrones ocupan los valles alrededor de dos puntos de Dirac no equivalentes en el espacio de momento. Este grado de libertad adicional, llamado pseudo-espín de valle, se puede usar para un nuevo tipo de electrónica, la valletrónica. El elemento clave de la valletrónica es un polarizador del espín de valle, que puede separar espacialmente los electrones de los dos valles diferentes. Las deformaciones elásticas en grafeno generan fuertes campos pseudo-magnéticos, que actúan con signos opuestos en los electrones en dos valles diferentes [1]. Esto sugiere la construcción de un polarizador de valle basado en este efecto [2-4], véase Fig. 1. Nuestros estudios cuantitativos del flujo de corriente en grafeno deformado por medio del método de funciones de Green (NEGF) confirman esta idea y muestran que se puede generar haces de corriente completamente polarizados [2], véase Fig. 2. En nuestro enfoque se logra una amplia separación espacial de las corrientes polarizadas y se transmite una gran parte de la corriente inyectada, que resulta en un dispositivo muy eficiente para tensiones por debajo de 1%. Las deformaciones elásticas en grafeno se pueden crear con la punta de un microscopio de efecto túnel o con la presión de un gas externo.

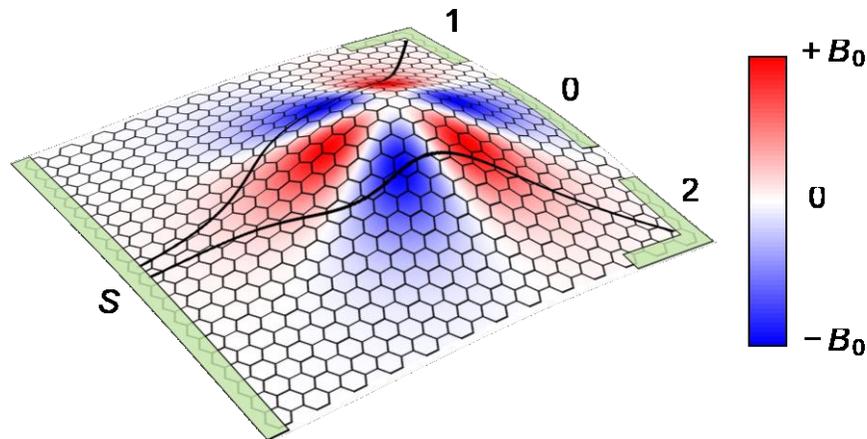


Fig. 1 Campo pseudo-magnético en una nanocinta de grafeno deformado, que actúa con signo opuesto en los dos valles. Por lo tanto, la corriente, que se inyecta por el contacto S y esbozada por las curvas negras, se divide en dos haces polarizados en el espín de valle.

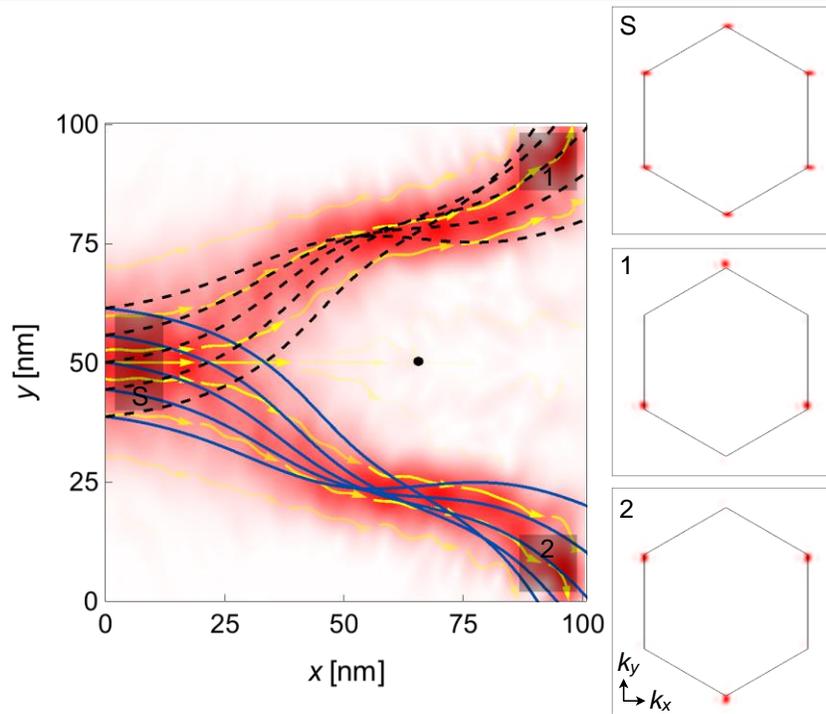


Fig. 2 Flujo de corriente en una nanocinta de grafeno deformado. La densidad de corriente, que se indica mediante el sombreado de color rojo, se desvía por la deformación. La polarización del valle, que se mide en las tres regiones rectangulares, muestra que la corriente se inyecta sin polarizar, mientras que los haces superior e inferior están completamente polarizados.

Referencias

- [1] T. Stegmann, N. Szpak, New J. Phys. **18**, 053016 (2016).
- [2] T. Stegmann, N. Szpak, 2D Mater. **6**, 015024 (2019).
- [3] M. Settles et al, Phys. Rev. Lett. **117**, 276801 (2016).
- [4] S.P. Milovanović et al, Appl. Phys. Lett. **109**, 203108 (2016)

Agradecimientos

Se agradece apoyo por el proyecto Fronteras 952 de CONACYT y el proyecto IA101618 de UNAM-PAPIIT

Efecto de la variación del número de pares de Cooper sobre las propiedades de los cupratos $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ bajodopados

Patricia Salas y M. A. Solís*

Instituto de Física, UNAM, Apdo. Postal 20-364, 01000 Ciudad de México, MEXICO

*Autor de correspondencia: masolis@fisica.unam.mx

Palabras clave: Superconductividad, cupratos bajodopados

Extendemos el Modelo Bosón-Fermión Multicapas [1] de la superconductividad para incluir el aumento en el número $f(T)$ de pares de Cooper conforme la temperatura decrece desde T_c y hasta $T = 0$, para los cupratos bajodopados $\text{Yba}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$. Reportamos la energía de condensación, los campos críticos superior e inferior, así como las longitudes de penetración y de coherencia, todas estas propiedades como funciones de la temperatura y del dopaje x . Al incluir la variación del número de pares de Cooper mejoramos significativamente nuestros resultados previos [2] donde $f(T) = f$ es constante por debajo de T_c , lo cual comprobamos mediante comparación de nuestros resultados previos y actuales con las mediciones experimentales.

Referencias

- [1] P. Salas, M. Fortes, M.A. Solís and F.J. Sevilla, *Physica C* **534**, 37 (2016).
- [2] P. Salas, M.A. Solís, M. Fortes and F.J. Sevilla, *Int. J. of Mod. Phys. B* **31**, 1750100 (2017).

Agradecimientos

Se agradece a: el apoyo del CONACyT a través del proyecto 221030, así como de la UNAM a través de los proyectos DGAPA-PAPIIT IN107616 y DGAPA-PAPIIT IN110319

Cuantización del amortiguamiento de Landau en películas y nanoestructuras metálicas

F. Pérez-Rodríguez^{1*}, S. G. Castillo-López¹, N. M. Makarov²

¹Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Pue., 72570, México

²Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Pue., 72570, México

*Autor de correspondencia: fperez@ifuap.buap.mx

Palabras clave: Dispersión espacial, Nanoestructuras metálicas

La influencia del amortiguamiento de Landau sobre la respuesta electromagnética no local de sistemas metálicos nanométricos es un tópico de gran interés en la actualidad. Al mejorar la calidad de las muestras, es decir, al reducir el coeficiente de relajación colisional, la absorción electromagnética llega a su límite inferior natural asociado con la aparición del amortiguamiento de Landau no colisional que es consecuencia de la dispersión espacial fuerte. Según trabajos que están basados en el formalismo semiclásico de la ecuación cinética de Boltzmann, el efecto del amortiguamiento de Landau sobre los espectros ópticos de películas y nanoestructuras metálicas en el rango de frecuencia de los THz resulta ser inevitable. En los rangos visibles y ultravioleta, se ha demostrado que el amortiguamiento de Landau controla la atenuación de los plasmones de superficie cuánticos en nanoestructuras metálicas. Sin embargo, en el régimen cuántico se cuestiona la interpretación del amortiguamiento de Landau que originalmente fue considerado como un fenómeno clásico. Nuestros estudios recientes [1-3] sobre la absorción infrarroja de películas ultra delgadas y nanoestructuras metálicas han permitido aclarar esta cuestión. En particular, se ha demostrado que debido a la dispersión espacial fuerte, la manifestación del amortiguamiento de Landau se favorece, no obstante, la cuantización de los números de onda tanto de los electrones como del campo electromagnético altera dramáticamente su efecto. Además, se ha encontrado que dicha discretización produce resonancias no locales cuánticas prominentes cuando el espesor de la película es menor que la longitud de penetración del campo electromagnético. El amortiguamiento de Landau en este caso se manifiesta precisamente como tales resonancias que trazan la curva espectral predicha en el marco del formalismo de la ecuación cinética de Boltzmann. Para espesores de película mucho mayores que la longitud de penetración del campo, el régimen clásico emerge y los resultados del modelo cuántico y de la aproximación de Boltzmann coinciden.

Referencias

- [1] S. G. Castillo-López, N. M. Makarov, y F. Pérez-Rodríguez, *Opt. Lett.* **43**, 2410 (2018).
- [2] S. G. Castillo-López, N. M. Makarov, y F. Pérez-Rodríguez, *Low Temp. Phys.* **44**, 1251 (2018).
- [3] S. G. Castillo-López, A. A. Krokhin, N. M. Makarov, y F. Pérez-Rodríguez, *Opt. Mater. Express* **9**, 673 (2019).

Agradecimientos

Se agradece a: CONACyT, VIEP-BUAP, y PFCE

Ánodos de silicio/carbón para baterías de ion de litio

María del Rocio Nava Lara * y Jazael Gómez Ocampo

*Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México Temixco, Morelos,
C.P. 62580, México*

*Autor de correspondencia: rnl@ier.unam.mx

Palabras clave: Silicio poroso, baterías, Litio

El silicio cristalino ha sido fundamental en el desarrollo la física del estado sólido, la industria microelectrónica y fotovoltaica debido a sus propiedades electrónicas. En la nanotecnología, el silicio ocupa un lugar especial debido a los efectos de confinamiento cuántico de los portadores de carga en nano partículas, nano alambres y silicio poroso. Así mismo, el silicio cristalino es clave para buscar incrementar la capacidad de almacenamiento de energía de las baterías de ion de litio. Se estima que mediante el reemplazo de los ánodos de grafito (que actualmente se emplean en las baterías comerciales) por ánodos de silicio se podría incrementar hasta 10 veces la capacidad de almacenamiento de energía de estas baterías. Sin embargo, es necesario el silicio en su forma nano estructurada para soportar los esfuerzos mecánicos que provocan los cambios volumétricos (hasta del 400%) generados por la carga y descarga de litio en el silicio. Los ánodos de nano estructuras de silicio pueden soportar mayor número de ciclos de carga y descarga de litio que el silicio en bulto. Por otro lado, no se pueden descartar completamente las estructuras de carbón debido a que tienen mayor estabilidad química, conductividad eléctrica y principalmente velocidad de carga de litio que silicio. En este trabajo presentaremos resultados en el desarrollo de fibras compuestas de carbón con nanoestructuras de silicio. Las fibras son fabricadas por la técnica de hilado centrifugado, con potencial de producción a escala industrial, y tienen capacidad de almacenamiento de litio aproximadamente dos veces mayor que el grafito.

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado parcialmente a través del proyecto PAPIIT IN109019, UNAM

Teoría cuántica de sólidos en espacio real

Chumin Wang*

*Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México Av.
Universidad 3000, Ciudad de México, México*

*Autor de correspondencia: chumin@unam.mx

Palabras clave: Espacio real versus espacio recíproco; Renormalización más convolución; Modelaje cuántico de dispositivos electrónicos

La Física del Estado Sólido se formula tradicionalmente en el espacio recíproco utilizando conceptos como la celda unitaria y la primera zona de Brillouin, así como el teorema de Bloch. Sin embargo, la presencia de interfaces estructurales en los dispositivos electrónicos -tales como diodos y transistores- provoca el rompimiento de la simetría traslacional y en consecuencia inhibe el uso del espacio recíproco. Una alternativa consiste en realizar el modelaje cuántico de estas heteroestructuras en el espacio real, basándose en modelos como el de amarre fuerte. Ahora, el reto es desarrollar métodos eficientes y precisos para abordar un número macroscópico de tomos. En esta charla presentamos un nuevo método de renormalización más convolución capaz de abordar en forma explícita 10^{24} átomos aperiódicamente estructurados. Como ejemplo, aplicaremos dicho método al cálculo de la conductividad eléctrica en heteroestructuras dentro del formalismo de Kubo, así como al transporte electrónico y fonónico en dispositivos termoeléctricos. Finalmente, la posibilidad de un modelaje cuántico en el espacio real de la superconductividad en nanoalambres también será discutida.

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por los proyectos CONACyT-252943, UNAMPAPIIT-IN106317 y supercómputo Miztli de la DGTIC-UNAM

Electric multipole insulator in a fractal lattice

Marco Antonio Díaz Villarreal¹, José Eduardo Barrios Vargas^{2*}

¹Facultad de Ciencias, UNAM, México

²Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM, México

*Autor de correspondencia: j.e.barrios@gmail.com

Palabras clave: fractal lattices, multipole insulators, self similarity

The common classification of the electronic phases (insulator, semiconductor, semimetal, and metal) of the matter is based on spectral properties. However, the discovery of the topological insulators (TI) added a new kind of classification based on topological information carried by the eigenstates of the system [1]. A topological insulator is a material that behaves as an insulator in the bulk and hosts conducting surface states, these are called topological edges states. The topological edges states are weakly affected by the disorder which is an attractive characteristic for applications. Recently, Benalcazar et al. Extended the classification of the topological phases where the topological states can be restricted to lower-dimensional edges [2,3]. For example, typically in a two-dimensional topological crystal, the topological states are hosted along the edges, but in the new classification the topological states can be just localized at the corners of the material, as a result, the material is an electric multipole insulator [4]. In this venue, we set-up an electric multipole insulator in a Sierpinski carpet. Then, we explore the self-similarity in the electric multipoles and the self-similarity in the electronic spectrum.

Referencias

- [1] M. Z. Hasan and C. L. Kane Rev. Mod. Phys. **82**, 3045 (2010)
- [2] W. A. Benalcazar, et al. Science **357**(6346), 61-66 (2017)
- [3] W. A. Benalcazar, et al. Phys. Rev. B, **96**, 245115 (2017)
- [4] F. Schindler et al. Science Advances, **4**(6), eaat0346 (2018)

Agradecimientos

Se agradece a: Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipiscing elit. Maecenas porttitor congue massa. Fusce posuere, magna sed pulvinar ultricies, purus lectus malesuada

Detección nuclear mediante dispositivos semiconductores de película delgada de CdS/CdTe

Gerardo Contreras Puente*

Escuela Superior de Física y Matemáticas–Instituto Politécnico Nacional, C.P. 07738, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: gscp1953@yahoo.com

Palabras clave: semiconductores, películas delgadas, detección nuclear

Los semiconductores policristalinos como CdTe son buenos detectores de neutrones, en particular nuestros resultados en la heteroestructura de película delgada de CdS/CdTe presentan respuesta a las radiaciones alfa y gamma. La eficiencia intrínseca de detección para las alfas es mayor a 80%, mientras que los dispositivos tienen baja respuesta a los gamma, lo cual es óptimo para no tener cuentas falsas debido a esta radiación. Cuando se acoplan nuestros dispositivos en materiales base boro detectamos la conversión a neutrones térmico

Teorema de convolución en redes no cúbicas

Vicenta Sánchez*

Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México Av. Universidad 3000, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: vicenta@unam.mx

Palabras clave: Fórmula de Kubo-Greenwood; Nuevo teorema de convolución; Más allá de redes cúbicamente estructuradas

La búsqueda de una relación entre el ordenamiento atómico y las propiedades macroscópicas de un material constituye una de las tareas principales de la Física del Estado Sólido. Por ejemplo, el teorema de Bloch establece funciones de onda electrónicas extendidas y una conducción balística si los átomos de un sólido se ordenan periódicamente. En el otro extremo, los sólidos amorfos de una y dos dimensiones con átomos colocados de forma al azar poseen sólo estados localizados exponencialmente [1]. En este trabajo, presentamos un nuevo teorema de convolución para la fórmula de Kubo-Greenwood en redes Laberinticas transformando la red bidimensional original en un conjunto de cadenas independientes con hamiltonianos reescalados [2]. Dicha transformación permite obtener una solución analítica de la conductancia DC, donde los escalones cuantizados tienen una altura de $2g_0$ en contraste con g_0 observada en la red cuadrada, siendo $g_0=2e/h$ el cuanto de la conductancia. Cuando este teorema de convolución se combina con el método de renormalización en el espacio real [3], podemos abordar de manera no perturbativa el transporte electrónico en la red Laberintica basada en cadenas de Fibonacci generalizadas de tamaño macroscópico [4]. Además, demostramos analíticamente la existencia de estados de transporte balístico en dicha red aperiódica. Este hallazgo sugiere que la periodicidad no debe ser una condición necesaria para el transporte balístico, incluyendo sistemas multidimensionales totalmente no periódicos. Por último, se discutirá la aplicabilidad de este nuevo teorema a redes hexagonales y triangulares.

Referencias

- [1] E. Abrahams, et al., Phys. Rev. Lett. 42, 673 (1979).
- [2] F. Sánchez, V. Sánchez y C. Wang, Eur. Phys. J. B 91, 132 (2018).
- [3] V. Sánchez y C. Wang, Phys. Rev. B 70, 144207 (2004).
- [4] F. Sánchez, V. Sánchez y C. Wang, J. Non-Cryst. Solids 450, 194 (2016).

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por los proyectos UNAM-IN115519 y supercómputo Miztli de la DGTIC-UNAM

Estudios de las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de superficies de semiconductores y nanoestructuras: Estudios de primeros principios

Gregorio H. Cocoltzi*

*Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Instituto de Física "Ing Luis Rivera Terrazas",
Apartado Postal J-48, Puebla 72570, México.*

*Autor de correspondencia: cocoltzi@ifuap.buap.mx

Palabras clave: GaN; DFT; Propiedades magnéticas

Los nitruros de la columna III de la tabla periódica han atraído la atención de la comunidad científica debido a sus propiedades físicas y aplicaciones tecnológicas. Estos materiales se pueden emplear en una gran variedad de dispositivos en la industria nano electrónica, por ejemplo: en transistores de efecto de campo o como componentes de dispositivos fotovoltaicos. Además sirven como sustratos para el depósito de metales y metales de transición. En esta plática se presentan estudios del depósito de metales sobre GaN(0001) y GaN(111). Se describirán estudios de las formaciones de nano estructuras sobre estas superficies. Los cálculos se realizan dentro de la teoría del funcional de la densidad periódica. Cuando se tratan materiales magnéticos se debe tomar en cuenta el espín en los sistemas, entonces se debe aplicar la teoría con polarización de espín. En todos los sistemas, primero se calcula la energía total, posteriormente se determinan las estructuras más estables mediante las energías de formación de la superficie y finalmente se estudian las propiedades electrónicas. En presencia de metales de transición los sistemas se modelan: sin magnetización, ferromagnético y anti ferromagnético. Los resultados se discuten en términos de la magnetización de los sistemas, los que sugieren que las superficies con metales de transición pueden emplearse en el área de la espintrónica

Uru₂Si₂: El orden oculto: características físicas y propiedades no entendidas

Roberto Escudero-Derat*

Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 70-360, Ciudad de México 04510, México.

*Autor de correspondencia: escu@unam.mx

Palabras clave: Uru₂Si₂, superconductividad, propiedades físicas

El compuesto Uru₂Si₂ es una aleación intermetálica superconductora con comportamiento tipo fermión pesado, tiene electrones *f* y electrones *d*. A bajas temperaturas, alrededor de 17K se desarrolla una característica electrónica, que hasta la fecha no se ha podido descifrar, inose sabe que es, ni a que se debe!. A mentores temperaturas la aleación se torna en superconductora con características no totalmente atendidas. A otras temperaturas, un poco más altas se observa antiferromagnético extremadamente débil.

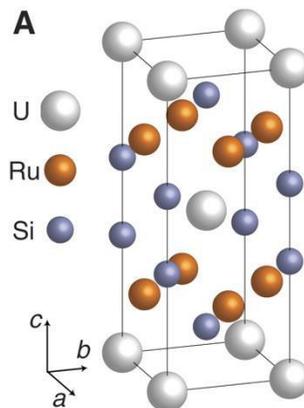


Fig. 1 Estructura cristalina del Uru₂Si₂

Dinámica del espín electrónico y nuclear en centros paramagnéticos de Ga en GaAsN a través del enfoque de sistema cuántico abierto

Alejandro Kunold Bello*

Área de Física Teórica y Materia Condensada, Universidad Autónoma Metropolitana Azcapotzalco
Ciudad de México, México.

*Autor de correspondencia: akb@azc.uam.mx

Palabras clave: Filtrado de espín, GaAsN, polarización circular

Los centros paramagnéticos de Ga²⁺ en el GaAsN, al igual que los centros nitrógeno-vacantes en el diamante e impurezas en el silicio han demostrado tener importantes cualidades útiles para el desarrollo de dispositivos espintrónicos. Por ejemplo, los centros de Ga²⁺ son responsables del mecanismo de filtrado de espín. Éste permite a los electrones de la banda de conducción alcanzar polarizaciones del espín de casi 100% a temperatura ambiente. En esta charla hablaré de los últimos hallazgos teóricos y experimentales sobre el efecto de filtrado de espín en trampas paramagnéticas de Ga²⁺ en GaAsN. Presentaré los resultados experimentales más relevantes obtenidos para la fotoluminiscencia y su grado de polarización circular en muestras de GaAsN. Finalmente discutiré la posibilidad de aplicar este fenómeno a la construcción de un dispositivo sensible al grado de polarización circular de la luz

Propiedades termo-ópticas de vidrios nanoestructurados

Emmanuel Haro-Poniatowski*

*Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana Iztapalapa, Apdo. Postal 55-534
CDMX, México*

*Autor de correspondencia: haro@xanum.uam.mx

Palabras clave: propiedades ópticas; nanopartículas metálicas; matriz vítrea

En esta plática estudiaremos las propiedades ópticas de diversos sistemas nanoestructurados en función de la temperatura. La particularidad de estos sistemas es que están compuestos por nanopartículas metálicas o semiconductoras embebidas en una matriz vítrea. Estas nanopartículas tienen un punto de fusión bajo comparado con la del vidrio que los rodea. Al calentar estos materiales las nanopartículas se funden dentro del vidrio y como están encapsuladas regresan a su estructura inicial al enfriarse. Se tiene entonces un sistema reversible estable con propiedades ópticas peculiares y con potenciales aplicaciones como sensores ópticos de temperatura

Electrical resistance behavior of a VO₂ Based memristive micro-device

J. Heiras^{1*}, A. Mamian², J. J. Realpe², G. Bolaños²

¹Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, México

²Universidad del Cauca, Facultad de Ciencias Naturales, Exactas y de la Educación, Departamento de Física, Laboratorio de Física de Bajas Temperaturas, Colombia.

*Autor de correspondencia: heiras@cryn.unam.mx

Palabras clave: vanadium dioxide, Metal-Insulator Transition, Structural Phase Transition, memristor

Among the most promising candidates for applications in the information processing nanotechnology electronics industry are some complex metal oxides in general and in particular VO₂. They are important since they do not face problems like the physical limits and its quantum effects or the disadvantages in current photolithography techniques. They comply with requirements having to do with power consumption, storage density and long retention of memory. VO₂ has some unique properties, such as the Structural Phase Transition (SPT) and the Metal-Insulator Transition (MIT), and is compatible with integration of CMOS devices to supply the next generation of universal memories. Vanadium dioxide undergoes both a MIT and SPT transition at a critical temperature of 68 °C. Below T_c, it exhibits semiconductor behavior and a monoclinic crystalline structure. At temperatures higher than T_c, it exhibits a metallic behavior and a tetragonal crystalline structure. We present some results obtained in) micro devices based VO₂ thin films 100 nm thick which were grown by Sputtering DC technique on sapphire (0001). A convenient micro device geometry for two terminal electrical measurements was defined using optical contact UV photolithography. MIT transition was controlled by voltage applied to the micro device at temperatures of 50, 53, 55 and 60 °C. A transition from a semiconductor to a metallic state was observed and found threshold voltages of 60, 36, 33 and 20 volts at the mentioned temperatures. Hysteresis in I vs. V was registered. Additionally, we obtained a memristive switching temperature dependent effect in a biased two-terminal VO₂ micro-device, where a decrement on resistance, with stable and clearly discernible resistance levels were observed as a function of the number of pulses applied. We propose a method that allows the identification of the specific regions of resistance in which the creation of multiple states is viable.

Agradecimientos

We acknowledge the support from Vicerrectoría de Investigaciones, Universidad del Cauca

Termodinámica de superconductores no convencionales

Luis A. Pérez*

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

*Correo electrónico: lperez@fisica.unam.mx

Palabras clave: Superconductividad no convencional; Modelo de Hubbard; Formalismo BCS, Formalismo de Bogoliubov-de Gennes

En ésta plática revisamos las principales propiedades físicas de los superconductores no convencionales, y mostramos como un modelo tipo Hubbard, que considera interacciones electrón-electrón de salto correlacionado (o de carga-enlace), es capaz de describir estados superconductores con simetrías s , p y d dentro del formalismo BCS. Los resultados muestran la existencia de temperaturas críticas óptimas a densidades de portadores de carga que dependen de la simetría de la brecha superconductora. Asimismo, el comportamiento de la capacidad calorífica electrónica con la temperatura depende de la simetría de los superconductores.

Por otra parte, utilizando el formalismo de Bogoliubov-de Gennes, estudiamos la formación de vórtices con cuantos de flujo magnético cuando se aplica un campo magnético externo a superconductores con diferentes tipos de interacción electrón-electrón. Los cálculos autoconsistentes de la brecha superconductora muestran la formación de vórtices en el espacio real cuya estructura depende de dicha interacción. Asimismo, el comportamiento de la brecha superconductora promedio como función de la intensidad del campo magnético también depende de la interacción electrón-electrón. Finalmente aplicamos este formalismo junto con el modelo de Hubbard generalizado al superconductor cerámico $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ y comparamos los resultados teóricos obtenidos para diferentes propiedades con los datos experimentales.

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por el proyecto UNAM-PAPIIT-IN107717. Los cálculos se llevaron a cabo en la supercomputadora Miztli de la DGTIC-UNAM.

Fases cuánticas exóticas en heteroestructuras bidimensionales

Gerardo G. Naumis*

Instituto de Física, Depto. De Sistemas Complejos, UNAM, Apdo. Postal 20-364, 01000, México, CDMX, México

*Autor de correspondencia: naumis@fisica.unam.mx

Palabras clave: grafeno; propiedades electrónicas; modos de Floquet

En esta plática abordaremos diversos aspectos de las propiedades electrónicas y ópticas de materiales bidimensionales. Nos concentraremos en nuevas fases cuánticas como patrones de Kekulé, líquidos de Luttinger, fases topológicas y superconductividad en patrones de Moiré formados por grafeno, así como interfaces grafeno-agua. También hablaremos del grafeno deformado mecánicamente usando esfuerzos que dependen del tiempo. Para incluir las deformaciones temporales desarrollamos una teoría que nos permite encontrar el operador de evolución temporal cuántico. Sus eigenvalores son las cuasienergías del sistema y las eigenfunciones son los llamados modos de Floquet. Esta metodología permite abordar la interacción campos electromagnéticos-portadores de carga con una novedosa perspectiva. Finalmente, discutiremos la relevancia de estos resultados bajo la luz del descubrimiento de superconductividad y transición de Mott en grafeno sobre sustratos rotados por ángulos mágicos

Crecimiento y Caracterización de Puntos Cuánticos de InP recubiertos de ZnS y Funcionalizados con Ácidos con Base en Mercaptos (MSA y MPA) para Aplicaciones como Marcadores Biológicos Fluorescentes

Daladier A. Granada Ramírez¹, Fabiola Vázquez Hernández², J. Saúl Arias Cerón³, María Lucero Gómez Herrera⁴, Juan Pedro Luna Arias⁵, Patricia Rodríguez Frago⁶, Julio G. Mendoza Alvarez⁶

¹ Programa de Nanociencias y Nanotecnología, CINVESTAV-IPN, Av. IPN 2508, CdMx 07360

² Universidad Autónoma de la Ciudad de México, Plantel Cuauhtepc, Av. La Corona 320, CdMx 07160

³ CONACYT-SEES, Departamento de Ingeniería Eléctrica, CINVESTAV-IPN, Av. IPN 2508, CdMx 07360

⁴ Facultad de Ingeniería, Univ. Autónoma de Querétaro, Cerro de las Campanas S/N, Querétaro 76010

⁵ Departamento de Biología Celular, CINVESTAV-IPN, Av. IPN 2508, CdMx 07360

⁶ Departamento de Física, CINVESTAV-IPN, Av. IPN 2508, CdMx 07360

*Autor de correspondencia: jmendoza@fis.cinvestav.mx

Palabras clave: Semiconductores, Puntos cuánticos, marcadores biológicos

Los semiconductores (SC's) son los materiales de mayor importancia para el desarrollo de las aplicaciones de la ciencia. Su presencia se da en prácticamente todos los ámbitos de la tecnología. Hacia finales de los 80s inició el desarrollo de los SC's a escalas nanométricas que produjeron nuevos fenómenos debidos al confinamiento cuántico de los portadores, electrones y huecos, produciendo la cuantización de los niveles de energía en las bandas de conducción (BC) y de valencia (BV) de los semiconductores, lo que ha generado nuevos materiales con nuevas propiedades ópticas, térmicas y eléctricas.

Uno de los campos de aplicación de los SCs nanocristalinos, también conocidos como puntos cuánticos (PCs). Es en el área de la biomedicina molecular, en donde éstos PCs pueden ser usados como marcadores fluorescentes de gran eficiencia, y largos tiempos de vida. Usando la técnica de síntesis conocida como "One Pot", o método de una etapa sin inyección de precursores calientes, se sintetizaron PCs de InP controlando el tamaño de los nanocristales a fin de controlar la longitud de onda de la emisión fluorescente (el color) para poder seleccionar el color del marcador.

Las propiedades estructurales de los PCs de InP se estudiaron a través de las técnicas de difracción de rayos X y de la microscopía electrónica de transmisión, las cuales nos mostraron las direcciones de cristalización de los nanocristales de InP, así como la presencia de nanocristales de In₂O₃, además de mostrar tamaños de nanocristales en el orden de los 6-8 nanómetros. Por medio de la absorción óptica (UV-Vis) y de la espectroscopía de fotoluminiscencia (FL), se pudieron obtener los valores de la energía de banda prohibida (E_g) y su variación con el tamaño de los PCs, así como el rango espectral de fluorescencia.

Se encontró que el recubrimiento de los PCs con ZnS y la funcionalización con los ácidos mercapto-succínico y mercapto-propiónico actúan como pasivadores de los defectos en la superficie de los PCs, mejorando la eficiencia de emisión. Se presentan los resultados de las caracterizaciones de las propiedades estructurales y ópticas de los PCs y su control a través de los parámetros de síntesis.

Desarrollo de materiales ópticamente selectivos basados en películas de óxido de aluminio impregnadas con níquel.

A.M. Fernández¹

Instituto de Energías Renovables, UNAM, Av. Xochicalco s/n, Col Rubén Jaramillo, Temixco, 62580, Morelos, México

*Autor de correspondencia: afm@ier.unam.mx

Palabras clave: Propiedades ópticas, óxido de aluminio, películas delgadas

La propagación de ondas electromagnéticas en medios inhomogéneos es muy importante en el desarrollo científico y tecnológico de hoy en día. Por ejemplo, los materiales para el aprovechamiento de la radiación solar o la búsqueda de yacimientos petrolíferos a través de la transmisión de ondas electromagnéticas proyectadas en la tierra son sistemas en los que se debe hacer el tratamiento del medio inhomogéneo. El sistema denominado como medio efectivo es el conjunto de propiedades efectivas que describen la propagación del haz coherente de la onda de propagación en un medio. Las teorías desarrolladas de Maxwell-Garnet y de Bruggeman consideran la inclusión de partículas pequeñas en el medio. Para el desarrollo de absorbentes de la radiación solar, cuyo objetivo es realizar un óptimo atrapamiento de la radiación, los conceptos de teoría del medio efectivo, es muy útil para determinar las diversas propiedades ópticas con la que se construyen dichos materiales. En esta intervención, se abordará los resultados encontrados en la preparación de la superficie selectiva compuesta de óxido de aluminio con incrustaciones de níquel. Se reporta que las características ópticas de estas películas alcanzaron absorptividades del orden de 0.9 y emisividades de 0.17. Así mismo se discute la técnica de elaboración de ellas y su influencia en la modificación de estas propiedades.

La ciudad de El Tajín durante la Época Prehispánica.

Olaf Jaime Riverón¹

*Encargado del Despacho de la Subdirección de la Zona de Monumentos Arqueológicos El Tajín -
Centro INAH Veracruz*

*Autor de correspondencia: olaf_jaime@inah.gob.mx

Palabras clave: El Tajín, Antropología, Epoca prehispánica

En esta plática se explicará la secuencia cultural de El Tajín, su relación con el paisaje y su aprovechamiento, sus logros científicos en astronomía, sistemas numéricos y el uso de materiales constructivos así como sus logros en representaciones pictóricas..

Sesiones Orales

Materiales activos desarrollados por métodos de vía húmeda para su aplicación en dispositivos semiconductores

Adriana García Gallardo¹, Joam M. Rincón Zuluoaga¹, Manuel A. Chairez Ortega¹, Mayra A. Hernández Granados¹, Jessica Lillo Ramiro¹, José S. Arellano Fierro¹, Laura A. Carrasco Chavez¹, María de la Luz Mota González², Amanda Carrillo Castillo^{1*}

¹*Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Departamento de Ingeniería Eléctrica y Computación, Av del Charro 450 N, Col Partido Romero C.P 32310, Ciudad Juárez Chihuahua, México*

²*CONACYT: Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Departamento de Ingeniería Eléctrica y Computación, Av del Charro 450 N, Col Partido Romero C.P 32310, Ciudad Juárez Chihuahua, México*

*Autor de correspondencia: amanda.carrillo@uacj.mx

Palabras clave: semiconductores, calcogenuros, biomateriales, óxidos, DBQ y sol gel

La industria de semiconductores electrónicos ha demostrado ser una vía para el desarrollo de la economía en nuestro país. Esta industria ha tenido un crecimiento acelerado en los últimos años, donde la búsqueda de nuevos dispositivos electrónicos que permitan una mayor comodidad en la vida del ser humano y un avance tecnológico en la actualidad es todo un reto. Materiales semiconductores alternativos han sido utilizados en el desarrollo de dispositivos electrónicos ya sea como semiconductores tipo p o tipo n. A pesar de estos desarrollos, dispositivos a base de silicio amorfo (a-Si:H) siguen siendo los más utilizados. Esfuerzos por sintetizar otros semiconductores tipo n para remplazar las altas temperaturas de proceso y altos costos de depósito que requiere la tecnología del a-Si:H hasta el momento ha impulsado el desarrollar materiales alternativos a este. Además aún existe la necesidad de desarrollar materiales semiconductores tipo p estables y con buenas propiedades eléctricas.

Recientemente en el grupo de trabajo de Bioingeniería y Nanotecnología en Electrónica Flexible y colaboradores hemos reportado diversos trabajos relacionados al estudio de condiciones de depósito de diferentes procesos para la obtención de materiales activos por diferentes procesos como es; la técnica depósito por baño químico y de sol gel asistido por la técnica de microrondas y centrifugado. Los materiales han sido sintetizados y caracterizados química, óptica, estructural y eléctricamente y nos hemos enfocado en su aplicación en las áreas de de energías y salud. Dentro de estos materiales se ha trabajado con materiales calcogenuros como son CdS, PbS, ZnS y CuS depositados en películas delgadas por baño químico para su aplicación en celdas fotovoltaicas y TFTs.

En materiales obtenidos por el proceso sol gel hemos reportado el desarrollo de biomateriales como zeolita tipo ZSM5, Bioglass 45S5 como sustratos activos para la inmovilización de diferentes análitos y óxidos y calcogenuros como transductores en el desarrollo de biosensores. Por lo que en la presente plática se mostraran breve, pero claramente los resultados obtenidos de la síntesis y caracterización de los materiales anteriormente mencionados, con la intención de lograr una difusión del trabajo que estamos realizando investigadores de la UACJ en el área de semiconductores.

Agradecimientos: CONACYT, Proyecto Ciencia Básica 2013- I0017- 22111 y Proyecto de APN 3529-2016

Óptica electrónica en heterouniones de grafeno

Emmanuel Paredes-Rocha^{1*}, Thomas Stegmann¹

¹Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad s/n, Col. Chamilpa, Cuernavaca, Morelos, México

*Autor de correspondencia: eparedes@icf.unam.mx

Palabras clave: grafeno, heterouniones, nanoelectrónica.

Se estudia el transporte cuántico en heterouniones np de grafeno, donde el dopaje de cada región se hace por un potencial electrostático. La propagación de los haces de electrones inyectados en la unión se calcula aplicando el modelo de enlace fuerte y el método de funciones de Green fuera de equilibrio (NEGF). Las heterouniones se modelan por interfaz abrupta y suave. Se hace la comparación entre la corriente cuántica y la aproximación semiclásica de la Ley de Snell de electrones (LSE) en la interfaz. Mostramos en general la validez de esta descripción para los electrones, ver Fig. 1a. Por la naturaleza ondulatoria de los electrones y el ancho finito del haz de electrones, se observan nuevos fenómenos, como un patrón ondulatorio paralelo a la interfaz, dispersión del haz de electrones y transmisión por la interfaz para ángulos mayores al ángulo crítico dado por la LSE, ver figuras 1a y 1b. También se comparan los valores de los coeficientes de transmisión y reflexión calculados a partir de la aproximación semiclásica y por el método NEGF, y se obtiene semejanza con ambas teorías. Por último, se muestran y discuten las posibles aplicaciones de las heterouniones de grafeno para varios dispositivos de la nanoelectrónica, como guías de onda, divisores y colimadores (ver fig. 1c) de haces de electrones.

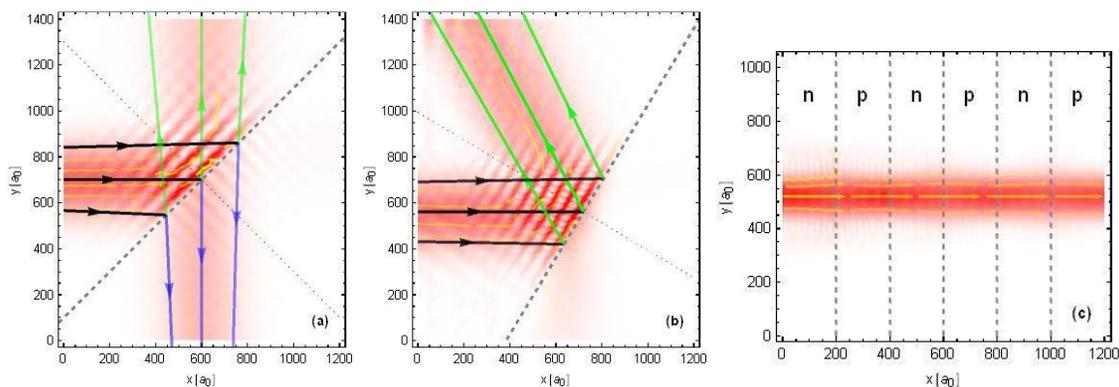


Fig. 1 Flujo de corriente (densidad en rojo y flechas en amarillo) y trayectorias semiclásicas como líneas sólidas. En (a) se muestra una heterounión de grafeno simétrica ($n=0$, $p=2E$, E energía de electrones) con interfaz a 45° . En (b) se muestra transmisión más allá del ángulo crítico. En (c) se muestra un colimador de haz con una secuencia de uniones np.

Agradecimientos

Se agradece al proyecto UNAM PAPIIT IA101618.

Síntesis y caracterización óptica, morfológica y estructural de películas delgadas de perovskitas híbridas: $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$

D.Y. Torres Martínez^{1,2*}, B. Aguilar², O. Navarro², A. Valdespino²

¹Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Av. Francisco J. Múgica S/N, Ciudad Universitaria. C.P.58030, Morelia, Michoacán, México.

²Universidad Nacional Autónoma de México, Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, Antigua Carretera a Pátzcuaro No 8701, Col Ex Hacienda San José de la Huerta. C.P.58190, Morelia, Michoacán, México.

*Autor de correspondencia: dytorresmtz@gmail.com

Palabras clave: Perovskitas híbridas, películas delgadas.

Las perovskitas híbridas representan una nueva y prometedora forma de fabricar celdas solares de alta eficiencia con las cuales recientemente se ha producido electricidad a partir de la luz solar. En este trabajo se ha sintetizado una perovskita híbrida orgánico-inorgánica utilizando el catión plomo (Pb^{2+}) para la red inorgánica y usando el yoduro de metilamonio como catión orgánico. La perovskita $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ mejor conocida como yoduro de plomo de metilamonio, fue obtenida a partir de una solución 1:1 molar de yoduro de metilamonio y yoduro de plomo (II). La solución obtenida fue depositada sobre sustratos de vidrio portaobjetos previamente lavados, desengrasados y atacados químicamente. Se utilizó un spin coater a 6000 rpm durante 20 segundos y posteriormente al sustrato ya recubierto se le dio un tratamiento térmico a 140°C en atmósfera abierta durante 2 minutos. Las películas delgadas obtenidas son altamente adherentes al sustrato y son de espesor uniforme. Las propiedades estructurales, ópticas y morfológicas de las películas de perovskita fueron estudiadas mediante difracción de rayos X, espectroscopia UV-vis, microscopía de fuerza atómica y microscopía electrónica de barrido. En el análisis SEM/EDS las películas de perovskita híbrida muestran una composición química homogénea. A partir del espectro de absorbancia y utilizando el modelo de Tauc fue posible calcular el ancho de banda prohibida del material, dando un valor de 1.52 eV.

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente financiado por los proyectos CONACYT 252677, PAPIIT-UNAM IN105019 y IN111218. Asimismo, se agradece al CONACYT por la beca postdoctoral 228420.

Estados magnéticos en nanopartículas de YIG ($Y_3Fe_5O_{12}$): un enfoque micromagnético

J.F. Barrón-López^{1,3*}, A.M. Bolarín Miró¹, F. Sánchez-De Jesús¹, G. Alvarez² y H. Montiel³

¹ Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería, Pachuca-Tulancingo Km 4.5, Ciudad del Conocimiento 42184, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México.

² Universidad Autónoma de la Cd. de México, Plantel Cuatepec, Av. de la Corona 320, Col. Loma de la Palma 07160, Gustavo A. Madero, Cd. de México, México

³ Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Circuito Exterior S/N, Ciudad Universitaria 04510, Coyoacán, Cd. de México, México

*Autor de correspondencia: jf.barron82@gmail.com

Palabras clave: Modelado Micromagnético, Histéresis, Vórtice magnético, nanopartículas, YIG.

Mediante simulaciones micromagnéticas [1] se determinó la configuración de mínima energía en partículas esféricas de YIG ($Y_3Fe_5O_{12}$) en función del radio ($40nm \leq R \leq 150nm$). Las partículas transitan del estado monodominio (MD) hacia el estado de vórtice magnético (Vt) en $R_{cr} \sim 68nm$ (Fig.1.A), como lo evidencian los cambios significativos en su energía magnetostática (u_d) y de intercambio (u_j). Los ciclos de histéresis magnética simulados (Fig.1.B) indican que la transición MD-Vt está asociada a un descenso marcado del campo coercitivo de la partícula. Los resultados del análisis micromagnético se discuten en relación con las mediciones experimentales obtenidas en partículas de YIG sintetizadas por el método de sol-gel.

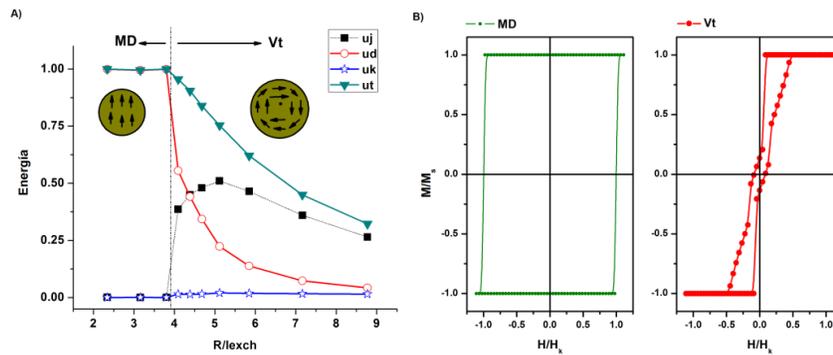


Fig. 1 A) Energía magnética del YIG en función del radio reducido (R/l_{exc} ; $l_{exc} = 17\text{nm}$). B) Ciclos de histéresis para partículas de YIG en estado monodominio (MD) y de vórtice magnético (Vt).

Referencias

- [1] H. Kronmüller, General Micromagnetic Theory. In: Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials Vol. **2**, (2007)

Agradecimientos

Se agradece a: DGAPA-UNAM por su financiamiento mediante el proyecto PAPIIT No. IG100517.

Ley de reflexión atípica y anti súper tunelamiento de Klein de electrones en uniones np del fosforeno

Y. Betancur-Ocampo*, T. Stegmann, y F. Leyvraz

¹Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, 62210
Cuernavaca, México.

*Autor de correspondencia: ybetancur@icf.unam.mx

Palabras clave: Fosforeno, uniones balísticas, transporte cuántico, ley de reflexión.

El comportamiento de los electrones en uniones np balísticas del fosforeno se asemejan a fenómenos de la óptica geométrica de luz. Es posible diseñar una variedad de dispositivos de óptica electrónica ajustando el nivel de Fermi y con la rotación de las compuertas que crean el potencial electrostático de paso en la unión. La estructura de bandas de energía fuertemente anisotrópica del fosforeno, que puede ser descrita desde el método de enlace fuerte, permite distinguir una relación de dispersión de los electrones semejante a la fermiones de Dirac (Schrödinger) con masa con respecto a la dirección del enlace zig-zag (arm-chair). Al utilizar el formalismo de las funciones de Green fuera del equilibrio como también la aproximación geométrica y del continuo, encontramos que existe una excelente concordancia entre el flujo de corriente cuántica y las trayectorias clásicas de electrones. Observamos que para uniones inclinadas np del fosforeno los ángulos de incidencia y de reflexión son diferentes. Establecemos regímenes de energía y de la orientación específica de la unión con respecto a la red cristalina para la realización de colimadores y lentes de Veselago asimétricas. Además, una nueva reflexión total y omnidireccional surge aún cuando todos los estados electrónicos están energéticamente permitidos. Tal efecto ha sido llamado como anti súper tunelamiento de Klein. Este efecto puede ser usado como un interruptor eficiente de nanodispositivos. Nuestros estudios pueden ser útiles en el control de electrones individuales y abre la posibilidad de iniciar la primera generación de experimentos de óptica electrónica en el fosforeno.

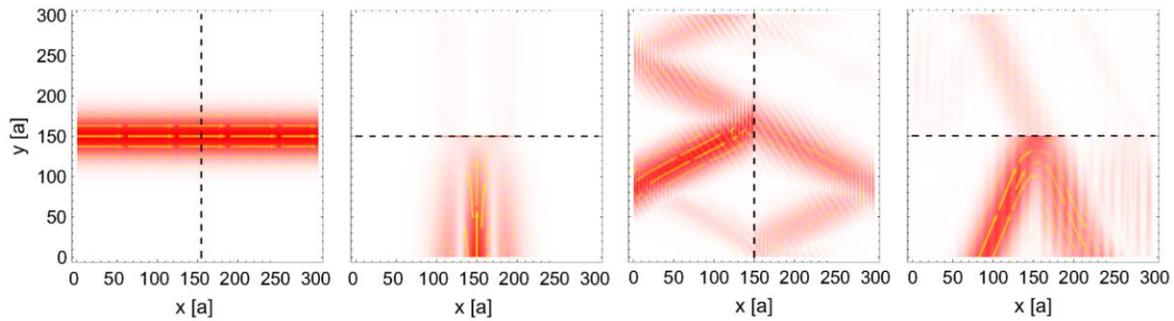


Fig. 1 Flujo de corriente en la unión np simétrica del fosforeno. La transmisión a través de la unión depende sensiblemente de la orientación de la red cristalina.

Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo otorgado por CONACYT-México en el marco del Proyecto Fronteras 952 Transporte en sistemas pequeños, clásicos, cuánticos y las becas de investigación UNAM-DGAPA-PAPIIT IN-103017 e IA-101618.

Cinética de reacción química experimental de la calcopirita, CuFeS_2 , y su explicación basada en métodos ab initio

J. A. Pérez Ruiz¹, A. Reyes Usuga^{1,3}, L. A. Ibarra Bracamontes², y G. Viramontes Gamboa^{1*}

¹ UMSNH, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Edif. Alfa

² UMSNH, Facultad de Ingeniería Mecánica, Edif. W Francisco J Mujica S/n, Morelia, Mich., México

³ IIM-UNAM Campus Morelia, Antigua carretera a Patzcuaro No 8701, Morelia, Mich., México

*Autor de correspondencia: gvgamboa@umich.mx

Palabras clave: Cinética de reacción, Calcopirita, Cálculos DFT

En este trabajo se presenta un estudio teórico experimental de la cinética de disolución química y electroquímica del mineral calcopirita, CuFeS_2 , puro y dopado con As, Pb y Zn. El estudio tiene como objetivo encontrar fundamentos teóricos que expliquen la cinética química obtenida experimentalmente con base en la energía de Fermi obtenida teóricamente mediante cálculos ab initio. Para relacionar la cinética química/electroquímica experimental como función de la energía de Fermi de los electrones en la fase sólida del mineral y del potencial redox de la solución se utiliza la teoría de Butler-Volmer.

La cinética de disolución se mide experimentalmente utilizando dos metodologías: a) mediante un arreglo electroquímico de tres electrodos, con un electrodo de trabajo de calcopirita de origen geológico natural procedente de tres lugares diferentes: Chihuahua, Temagami Canadá y Oaxaca. Como electrolito se utiliza una solución acuosa en medio sulfato y como electrodo de referencia se utilizó Calemel saturado, b) mediante experimentos de lixiviación en reactores agitados a temperatura y potencial redox controlado en medio $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2\text{SO}_4-\text{Fe}^{3+}-\text{Fe}^{2+}$.

Los niveles de Fermi de las fases del mineral pura y dopado con As, Pb y Zn se obtuvieron mediante la teoría del funcional de la densidad utilizando la suite de códigos Quantum Espresso con la aproximación GGA+U. Para todos los elementos involucrados se utilizaron pseudopotenciales PBE con funcionales ultrasoft, la energía de corte para el conjunto de ondas planas fue de 120 Ry y una malla de puntos K para la primera zona de Brillouin de $9 \times 9 \times 5$.

Los resultados experimentales de cinética electroquímica siguen un comportamiento exponencial como función del potencial aplicado que se ajusta aceptablemente a la ley de Tafel, $i = i_0 \exp(-\beta(\eta - \eta_0))$. Los valores teóricos de la energía de Fermi varían según el porcentaje de dopaje de los diferentes elementos en un rango aproximado de 6 a 9.5 eV. Cuando estos valores de la energía de Fermi se utilizan en la ecuación de Butler-Volmer se obtiene una expresión teórica para la velocidad experimental de disolución electroquímica que se ajusta razonablemente bien con las medidas experimentales.

Agradecimientos: Agradecemos a la CIC-UMSNH y al CONACyT proyecto CB-223500 por el apoyo para la realización de este proyecto.

Determinación del comportamiento fototérmico de un recubrimiento hecho a base de hollín

H. Rebollo Sandoval*, L. M. Hernández Ramírez, G. Viramontes Gamboa, M. C. Peña Gomar, D. Cardona Ramírez

UMSNH, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Gral. Francisco J. Múgica SN, Felicitas del Río 58004, Morelia Michoacán, México

*Autor de correspondencia: hrebollo@fismat.umich.mx

Palabras clave: Hollín, Recubrimiento

Se presentan los resultados del comportamiento fototérmico de una superficie que está hecha a base de hollín de resina de pino, que tiene la propiedad de mejorar la absorción de calor para su aplicación en tecnologías solares. El recubrimiento de hollín se depositó sobre placas metálicas de acero inoxidable, primeramente se llevaron a cabo pruebas fototérmicas sobre las placas de acero sin el recubrimiento con fines comparativos. Posteriormente variamos los parámetros de espesor y el área de recubrimiento de hollín sobre el sustrato. Encontramos que la temperatura aumentaba de manera proporcional al área recubierta de hollín, observamos que al variar el espesor del recubrimiento de hollín la temperatura aumentó respecto de la muestra sin recubrimiento, para posteriormente tener un decaimiento de la temperatura al incrementar el espesor, de modo que se puede inferir que existe un espesor crítico con el cual se alcanza la máxima temperatura sobre la placa. Finalmente fue posible ajustar los datos experimentales de la temperatura en función del tiempo con un modelo de transferencia de calor en estado transitorio [1], con el cual se obtuvo información de los parámetros térmicos que están relacionados con el sustrato, y con el recubrimiento, observándose que el parámetro relacionado con el sustrato se mantiene constante, y el parámetro relacionado con el recubrimiento depende del área recubierta y del espesor del hollín.

Referencias

[1] José Ángel Manrique Valadez. Transferencia de calor. Segunda edición. Oxford. México 2011.

Agradecimientos

Agradezco a CONACyT por el apoyo otorgado para llevar a cabo este trabajo de tesis, con el proyecto 247719 CONACyT Problemas Nacionales 2014, y al posgrado en ingeniería física de la facultada de ciencias físico matemáticas de la UMSNH.

Estudio de la densidad de estados y la función de onda en una red de Penrose

E. Huipe-Domratcheva^{1,2*}, O. Navarro²

¹Universidad Nacional Autónoma de México; Escuela Nacional de Estudios Superiores, Unidad Morelia; Antigua Carretera a Pátzcuaro, No. 8701, Colonia Exhacienda de San José de la Huerta, 58190, Morelia, México.

²Universidad Nacional Autónoma de México; Unidad Morelia, Instituto de Investigación en Materiales; Antigua Carretera a Pátzcuaro, No. 8701, Colonia Exhacienda de San José de la Huerta, 58190, Morelia, México.

*Autor de correspondencia: ernesto.h.957@gmail.com

Palabras clave: Cuasicristal, Penrose, Densidad de Estados.

El descubrimiento de los cuasicristales por D. Schectman et al.[1] estimulo el interes en la física de estos materiales que son fases intermedias entre las estructuras periódicas y aleatorias. Un problema importante en la física del estado sólido, es investigar si las estructuras cuasiperiódicas tienen nuevas propiedades físicas. Es difícil describir las propiedades en estos materiales debido a la falta de periodicidad, lo que hace que no exista una teoría rigurosa de la estructura electrónica específica para estos arreglos. Si uno quiere analizar la función de onda electrónica, se encontrará que esta presenta un comportamiento crítico, es decir, una combinación de estados localizados y extendidos. En este trabajo, se considera el Hamiltoniano de amarre fuerte en una red de Penrose dentro del modelo de vértices en donde se localizan los átomos de la red, consideramos solo interacciones a primeros vecinos si los sitios están conectados por una arista de la red. Analizamos cualitativamente el estado para la mínima energía y para el estado con energía igual a cero. Se calcula también la densidad de estados total y local para distintos sitios de la red de Penrose.

Referencias

[1] D. Shechtman, I. Blech, D. Gratias, y J.W. Cahn, "Metallic phase with long-range orientational order and no translational symmetry". Physical Review Letters, **53** (1984).

Agradecimientos

Se agradece a proyecto No. 252677 de Conacyt y al PAPIIT IN105019 de la UNAM

Oscilaciones de Rabi en cavidades acústicas acopladas fabricadas a base de silicio poroso

Zorayda Lazcano, Diosdado Villegas, y Jesús Arriaga*

Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, México

*Autor de correspondencia: arriaga@ifuap.buap.mx

Palabras clave: Oscilaciones de Rabi, Cavidades acopladas

En este trabajo, teniendo en cuenta el paralelismo existente entre las cavidades ópticas y acústicas se diseña una estructura formada por dos cavidades acústicas acopladas fabricadas a base de Silicio poroso. La estructura se fábrica por anodización electroquímica de sustratos de Silicio poroso. La transmisión acústica de las muestras es medida utilizando un par de transductores piezoeléctricos con respuesta en la región de los GHz y un analizador de redes vectorial, capaz de detectar tanto la amplitud como la fase de la señal transmitida.

Por otra parte, el comportamiento semiclásico de un sistema cuántico de dos niveles excitado por radiación cercana a la resonante genera oscilaciones de los estados de la población conocidas como oscilaciones de Rabi [1,2]. El sistema estudiado representa un análogo acústico de este efecto. La excitación del sistema de cavidades acopladas con un par de pulsos gaussianos desplazados temporalmente nos proporciona información directa del cambio de signo del campo transmitido después de transcurrido un período completo de una oscilación tipo Rabi. Este comportamiento es semejante al cambio de signo experimentado por las funciones de onda de spin durante rotaciones de 2π [3]. Las simulaciones numéricas se realizaron utilizando el método de la matriz de transferencia. Para observar las oscilaciones tipo Rabi en la transmisión acústica medida experimentalmente y la calculada de forma teórica, se lleva a cabo el proceso mostrado en la Figura 1. El periodo de las oscilaciones de Rabi (Ω_R) cumple con la condición $\Omega_R(t_0 - t_1) = 4\pi$, en analogía con este fenómeno en mecánica cuántico y óptica.

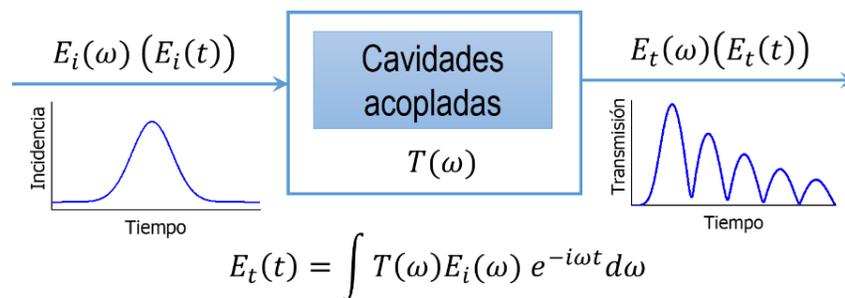


Fig. 1 Función de transferencia del sistema de cavidades acopladas.

Referencias

- [1] A. A. Batista y D. S. Citrin, *Phys. Rev. Lett.* **12**, 085324 (2004).
- [2] K. A Fischer, L. Hanschke, M. Kremser, J. J Finley, K. Müller y J. Vučković, *Quantum Sci. Technol.* **3**, 014006 (2018).
- [3] O. Di Stefano, R. Stassi, A. Rdolfo, S. Patanè y S. Savasta, *Phys. Rev. B* **84**, 085324 (2011).

Agradecimientos

D. Villegas agradece la hospitalidad del Instituto de Física de la Benémerita Universidad Autónoma de Puebla.

Síntesis de la doble perovskita estequiométrica $Sr_{2-x}M_xFe_{1+y}Mo_{1-y}O_6$ ($M = La, Nd$), propiedades y caracterización magnética

B. Aguilar^{1*}, T. Soto^{1,2}, Y. Barrera^{1,2}, J. De La Torre¹, O. Navarro¹

¹Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. ex-Hacienda San José de la Huerta, C.P. 58190, Morelia, Michoacán, México.

²Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. F.J. Mujica s/n Cd. Universitaria, Morelia, Michoacán, México

*Autor de correspondencia: berthao2002@hotmail.com

Palabras clave: doble perovskita, temperatura de Curie, dopaje.

La doble perovskita Sr_2FeMoO_6 se caracteriza por presentar magnetorresistencia colosal, y por sus aplicaciones en espintrónica. Con el objetivo de aumentar los electrones itinerantes en el sistema Sr_2FeMoO_6 , y por consiguiente aumentar la temperatura de Curie (TC), el Sr se dopa con La y Nd; sin embargo, el dopaje con estos iones induce desorden antisitio entre el Fe y el Mo. Para minimizar este desorden, se ajustan las cantidades de Fe y Mo, de manera que se conserve la neutralidad de la carga en la molécula. De este modo, los valores de x son 0, 0.25, 0.5, 0.75 y 1.0, mientras que para y, los valores correspondientes son 0, 0.125, 0.25, 0.375 y 0.5, respectivamente. Las muestras obtenidas se caracterizaron por difracción de rayos X, obteniendo una estructura cristalina tetragonal para toda la serie con La. Para la serie con Nd se obtiene la misma estructura tetragonal para dopaje bajo, mientras que para dopajes más altos, se tiene un cambio estructural. Mediante la espectroscopía XPS, se aprecia una variación en la valencia del Fe en la serie con La, mientras que la serie con Nd, esta variación no se presenta. Por otro lado, la TC aumenta en ambos sistemas, aunque la magnetización de saturación no tiene la misma tendencia: se observa que esta aumenta para dopaje bajo, mientras que para dopajes altos, disminuye.

Estudio de propiedades ópticas no lineales en pozos cuánticos escalonados dobles en GaAs/AlGaAs

J. C. Martínez-Orozco^{1,*}, K. A. Rodríguez-Magdaleno¹, F. Ungan²

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina Paseo a La Bufa S/N. C.P. 98060, Zacatecas, Zac., México.

²Cumhuriyet University, Faculty of Technology, Department of Optical Engineering, Turkey.

*Autor de correspondencia: jcmartinez@uaz.edu.mx

Palabras clave: Óptica no lineal, Laser intenso, AlGaAs.

Presentamos el cálculo numérico del coeficiente de absorción y el cambio relativo del índice de refracción considerando las propiedades ópticas lineales y su corrección no lineal de tercer orden. Este estudio se realizó para un pozo cuántico GaAs/AlGaAs escalonado doble, sometido a un campo eléctrico constante aplicado a lo largo de la dirección de crecimiento y a un campo magnético constante B en el plano, así como el efecto de láser intenso. El cálculo de la estructura electrónica se obtuvo al trabajar bajo la aproximación de masa efectiva y la ecuación de Schrödinger se resolvió mediante un procedimiento de diagonalización. El estudio de las propiedades ópticas se calculan utilizando la expresión de formalismo de matriz compacta bien establecida para las propiedades ópticas no lineales de interés. En general, encontramos que los parámetros estructurales como el potencial escalón o la barrera central permiten controlar el pico de resonancia y su amplitud. El sistema se vuelve más sensible al campo eléctrico que al magnético, y finalmente el láser intenso no resonante puede cambiar fuertemente las propiedades ópticas de interés. Los resultados indican que la implementación del potencial escalonado, experimentalmente factible, mejora las propiedades ópticas de interés, que se encuentran en el rango de THz y pueden usarse para diseñar un fotodetector o incluso puede usarse para el diseño de láseres cuánticos de cascada.

Dispositivos fotónicos de silicio poroso: Diseño multiescala y fabricación

Alessio Palavicini y Chumin Wang*

Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad 3000, Cd. Mx., México

*Autor de correspondencia: chumin@unam.mx

Palabras clave: Fabry-Perot; Silicio poroso; FTIR; Modelado multiescala

El silicio poroso es notable por su potencial aplicación en sensores de líquidos y gases fácilmente integrables en circuitos electrónicos y fotónicos. Además, tiene la facilidad para producir dispositivos ópticos con variaciones de índice de refracción bajo diseño a través de la porosidad local. Desde el punto de vista teórico, el diseño ab initio de estos dispositivos ópticos todavía no es factible usando la capacidad de cómputo actual y una alternativa es usar una combinación de métodos cuánticos y de electromagnetismo clásico aplicados a distintas escalas del sistema [1]. En este trabajo presentamos un diseño híbrido uniendo la Teoría del Funcional de la Densidad con electromagnetismo clásico de una cavidad óptica de Fabry-Perot, así como su verificación experimental a través de la síntesis de multicapas de silicio poroso y su caracterización mediante la espectroscopía infrarroja con transformada de Fourier (FTIR). Los resultados de las mediciones tienen una buena concordancia con la predicción multiescala [2].

Referencias

- [1] A. Palavicini y C. Wang, *Applied Physics B* **124**, 65 (2018).
[2] A. Palavicini y C. Wang, *J. Mater. Sci.-Mater. El.*, doi: 10.1007/s10854-019-01037-1 (2019).

Agradecimientos

Se agradece a: Alberto López, Alejandro Pompa y Yolanda Flores por su asistencia técnica, y los proyectos UNAM-IN106317, CONACYT-252943 y de supercómputo Miztli de la DGTIC-UNAM.

Magnetoimpedancia en sistemas magnetoeléctricos $\text{CoFe}_2\text{O}_4/\text{BaTiO}_3$

H. Montiel^{1*}, E. López-Moreno¹, y G. Alvarez²

¹Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Circuito Exterior S/N, Ciudad Universitaria 04510, Coyoacán, Cd. de México, México

²Universidad Autónoma de la Cd. de México, Plantel Cuatepec, Av. de la Corona 320, Col. Loma de la Palma 07160, Gustavo A. Madero, Cd. de México, México

*Autor de correspondencia: herlinda.montiel@icat.unam.mx

Palabras clave: Magnetoeléctricos, magnetoimpedancia, óxidos magnéticos.

Los materiales magnetoeléctricos, generalmente, se presentan en heteroestructuras que se forman al combinar capas de material ferromagnético y ferroeléctrico, con el objetivo de inducir el efecto magnetoeléctrico, este efecto se originan por la combinación de las propiedades del material magnético ordenado con un material piezoeléctrico, donde una polarización eléctrica es originada por una inducción magnética, y/o aparece una inducción magnética al aplicar un campo eléctrico. Por otra parte la respuesta eléctrica y magnética en función de la frecuencia de estos sistemas ha sido poco analizada, en este trabajo se presenta la caracterización estructural, eléctrica y magnética en función de la frecuencia del sistema magnetoeléctrico $\text{CoFe}_2\text{O}_4/\text{BaTiO}_3$. El sistema fue depositado con la técnica de laser pulsado. Se realizó la caracterización estructural mediante difracción de Rayos X y espectroscopia Raman. Las propiedades magnéticas revelan un incremento en el campo coercitivo asociado al incremento en la anisotropía magnética por la contribución de la interfaz, de la caracterización eléctrica AC se observa el cambio de la impedancia como función del campo magnético, esta respuesta puede ser inducida por defectos puntuales y microestructurales originados por el método de depósito [1]. Cabe mencionar que este comportamiento se observa en ferromagnéticos metálicos suaves.

Referencias

[1] E. López-Moreno, H. Montiel, A. Conde, G. Alvarez, Journal of Superconductivity and Novel Magnetism, article in press (2018).

Agradecimientos

Los autores agradecen a la UNAM, quien a través de su Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA) ha financiado este trabajo mediante el proyecto PAPIIT No. AG100517-IG100517.

Técnica de contraste de reflectancia en el límite óptico de campo cercano: aplicación al Grafeno

G. Flores-Rangel^{1*}, L.F. Lastras-Martínez¹, D. Medina-Escobedo¹, O. Ruiz-Cigarrillo¹, R. Castro-García¹, R.E. Balderas-Navarro¹, M. del P. Morales-Morelos¹, J. Ortega-Gallegos¹, A. Lastras Martínez¹ y M. Losurdo²

¹Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Álvaro Obregón 64, CP 78000, San Luis Potosí SLP, México.

²Institute of Nanotechnology, CNR-NANOTEC, Department of Chemistry, via Orabona 4, Bari, Italy

*Autor de correspondencia: gflores@cactus.iico.uaslp.mx

Palabras clave: campo cercano, grafeno, contraste óptico, NSOM.

Las propiedades físicas únicas e interesantes que exhibe el grafeno lo han considerado como un material prometedor para el desarrollo de dispositivos en tecnología de semiconductores [1,2]. Es por ello que la caracterización de capas de grafeno resulta de suma importancia para el desarrollo de nuevos métodos de sintetización, así como aplicaciones particulares. Existen técnicas tales como microscopía de fuerza atómica (AFM), espectroscopia Raman y contraste óptico para la determinación del espesor de las capas de grafeno, sin embargo, las caracterizaciones ópticas se limitan por el tamaño del spot ($1\mu\text{m}$) [3], lo cual dificulta el conocer la señal proveniente de una capa de grafeno con espesor uniforme.

En este trabajo reportamos imágenes de contraste de reflectancia diferencial (DRC) de capas de grafeno exfoliadas sobre SiO_2/Si mediante microscopía óptica de escaneo de campo cercano (NSOM) con resolución espacial de 40nm, también se muestra mediante un modelo de múltiples reflexiones (Grafeno/ SiO_2/Si) y mediciones de elipsometría que el contraste óptico se puede modular cambiando el espesor de SiO_2 y la longitud de onda incidente.

Referencias

- [1] K.S. Novoselov, A.K. Geim, . Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I.V. Grigorieva and A. Firsov, *Science* **306**-666-669(2004).
- [2] T. J. Echtermeyer, P. S. Nene, M. Trushin, R. V. Gorbachev, A. L. Eiden, S. Milana, Z. Sun, J. Schliemann, E. Lidorikis, K. S. Novoselov, and A. C. Ferrari, *Nano Lett* **14**, 3733–3742 (2014)
- [3] Z. H. Ni, H. M. Wang, J. Kasim, H. M. Fan, T. Yu, Y. H. Wu, Y. P. Feng, and Z. X. Shen, *Nano Lett.* **7**, 2758–2763 (2007).

Agradecimientos

Al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología por el apoyo otorgado, agradecer a E. Ontiveros, F. Ramirez Jacobo, L.E. Guevara Macias y J. Gonzalez Fortuna por su apoyo técnico.

Sesiones de Carteles

Propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres de Ge con Li intersticial y superficial

D. Fernández-Lara^{1*}, F. Salazar¹, A. Miranda¹, A. Trejo-Baños¹, L. A. Pérez², E. Carvajal¹ y M. Cruz-Irisson¹

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, 04430, Ciudad de México, México

²Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 20-364, 01000, México, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: david_fdz_lara@hotmail.com

Palabras clave: Nanoalambres de Ge, baterías de Li, propiedades mecánicas

El uso de arreglos de nanoalambres de germanio (Ge) como materiales anódicos es muy atractivo por su alta capacidad de almacenamiento de litio (Li) debido a su gran superficie. El espacio entre nanoalambres, en los arreglos, permite disipar los esfuerzos internos en los procesos de carga y descarga eliminando las fracturas internas que presenta el Ge en bulto. En este trabajo se presenta un estudio teórico de la estructura electrónica de bandas, energía de formación, energía de enlace y módulo de Young de nanoalambres de Ge pasivados con H, crecidos en las direcciones cristalográficas [111] y [001] con Li intersticial y superficial [1]. Los cálculos se realizan usando la Teoría del Funcional de la Densidad, en la aproximación de densidad local. Los resultados indican que la inserción de Li intersticial tiene como resultado un comportamiento metálico del nanoalambre, mientras que la inserción de Li superficial mantiene el comportamiento semiconductor. La energía de formación y la energía de enlace del Li, aumentan como función de la concentración de Li, en el caso intersticial, lo que indica un cambio estructural importante. En contraste, las energías de formación y de enlace disminuyen como función de la concentración de Li en el caso superficial, este comportamiento se observa en ambas direcciones cristalográficas para los dos tipos de litiación estudiados. Estos resultados ayudan a entender como se modifican las propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres de Ge en los procesos de carga y descarga, así como su posible aplicación como material anódico.

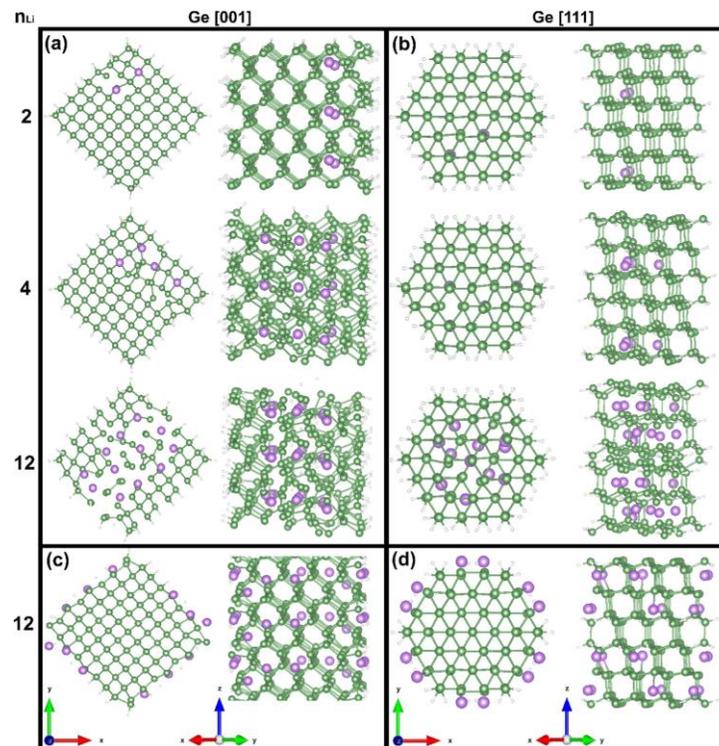


Fig. 1 Secciones transversal y lateral de nanoalambres relajados de Ge con 2, 4 y 12 átomos de Li intersticial (a), (b) y con 12 átomos de Li superficial (c), (d).

Referencias

- [1] A. González-Macías, F. Salazar, A. Miranda, A. Trejo-Baños, L. A. Pérez, E. Carvajal y M. Cruz-Irisson, Lithium effects on the mechanical and electronic properties of germanium nanowires *Nanotechnology* **29**, 154004 (2018).

Agradecimientos

Se agradece a: el proyecto multidisciplinario 2018-1969 de la Secretaría de Investigación y Posgrado del IPN. Los cálculos se realizaron en Abacus-CINVESTAV y LANCAD-UNAM-DGTIC-180.

Propiedades electrónicas y mecánicas de Monocapas de TiS_2 enfocadas al almacenamiento de energía eléctrica

J.E. Antonio¹, A. Trejo¹ y M. Cruz-Irisson^{1*}

¹Intituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, 04430, Ciudad de México, México.

*Autor de correspondencia: jaime.antonio.gin2017@gmail.com

Palabras clave: TiS_2 , DFT, Baterías de Litio.

El Disulfuro de titanio, se ha utilizado para cátodos para baterías de ácido-plomo y en baterías de iones de litio [1], sin embargo debido a recientes desarrollos experimentales no se ha explorado la posibilidad de utilizar pocas capas para el almacenamiento de energía. Se utilizó la Teoría de los Funcionales de la Densidad para estudiar las propiedades electrónicas de monocapas, bicapas y tricapas de TiS_2 y se compararon con las del material en bulto. Se hace un corte inicial en el cristal, en la dirección de crecimiento (0001), dejando únicamente de una a tres capas del material. Se observa que las monocapas de TiS_2 tienen un comportamiento de semiconductor[2], sin embargo, al ir aumentando el número de capas el material comienza a tender hacia un comportamiento metálico, como el material en bulto. Con iones de litio las monocapas adquieren un comportamiento metálico lo cual es favorable para su empleo en baterías.

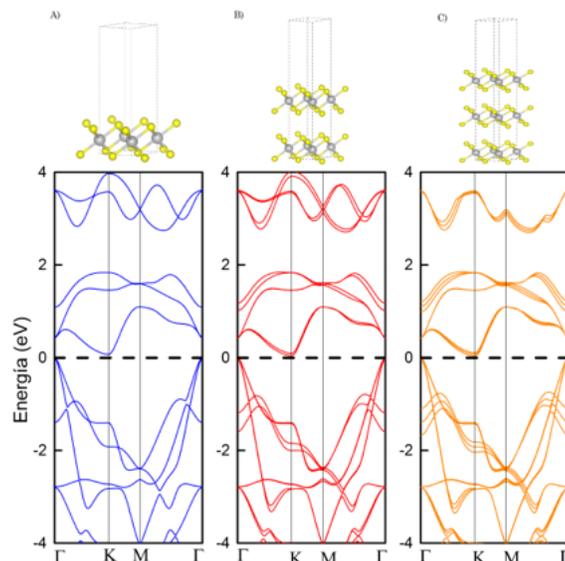


Figura 1. Estructura de bandas electrónicas de: A) Monocapa, B) Bicapa y C) Tricapa de TiS_2 . Las esferas amarillas y grises representan el Azufre y Titanio respectivamente

Referencias

- [1] A. J. Salkind, R. O. Hammel, A. G. Cannone, F. A. Trumbure, D. Linden, and T. B. Reddy, *Handbook of Batteries*. 2002.
- [2] K. Dolui and S. Sanvito, "Dimensionality-driven phonon softening and incipient charge density wave instability in TiS_2 ," *Epl*, vol. **115**, no. 4, 2016.

Agradecimientos

Se agradece a: Dr. Alejandro Trejo Baños, M.C. Jose Miguel Cervantes y Dr. Miguel Cruz Irrison.

Propiedades del Transporte y termoeléctricas del valle-espín con desorden en un superred de Siliceno

O. Oubram¹, O. Navarro², E.J. Guzmán^{2,3}, I. Rodríguez-Vargas⁴

¹Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209, Morelos, Cuernavaca, México.

²Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. Ex Hacienda de San José de la Huerta, 58190, Michoacán, Morelia, México.

³Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. Francisco J. Mujica s/n Ciudad Universitaria, Michoacán, Morelia, México.

⁴Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad Esquina con Paseo la Bufa S/N, 98060, Zac., Zacatecas, México

*Autor de correspondencia: oubram@uaem.mx

Palabras clave: Conductancia, Seebeck, Valle-espín, Desorden, Siliceno, Superred

Hoy en día, los cristales bidimensionales (por ejemplo, Grafeno, Siliceno, Germaneno, Estaneno, Fosforeno, etc.) se convierten en el centro de interés de la Comunidad científica y experimental, por sus fascinantes propiedades físicas. En este trabajo, estudiamos las propiedades del transporte y de la termoelectricidad en la valle-espín para un superred del siliceno desordenado. En particular, estudiamos las propiedades de la conductancia, del efecto Seebeck, así como el factor termopotencia en un superred periódico y/o desordenada. Demostramos que la magnitud del desorden en alto y ancho de la barrera desempeña un papel para suprimir la conductancia, la magnitud de Seebeck y el factor termopotencia. A diferencia de la fluctuación asociada al potencial local, las propiedades de transporte y termoeléctricas están insensible al desorden. Los resultados que hemos encontrado pueden ser una guía en el diseño y la modulación de las propiedades termoeléctricas y de transporte en los superred del Silicene.

Transporte termoeléctrico en sistemas de ADN

J. E. González^{1*}, V. Sánchez² and C. Wang³

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, 04440, Mexico City, Mexico

²Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad 3000, 04510, Mexico City, Mexico

³Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad 3000, 04510, Mexico City, Mexico

*Autor de correspondencia: jegonzalezmireles@gmail.com

Palabras clave: Cuasiperiodicidad, Termoelectricidad, ADN

Los transportes electrónico y fonónico en cadenas de ADN, construidas a partir de diferentes segmentos de pares de bases ordenados en secuencias periódicas y cuasiperiódicas, son analizados dentro del formalismo de Boltzmann-Landauer. El orden cuasiperiódico es introducido a través de las cadenas de Fibonacci poli(G)-poly(C) de longitud macroscópica, analizadas por medio de un método de renormalización del espacio real. El modelo de espina de pescado y el modelo de grano grueso de dos sitios más el potencial de interacción del Born se utilizan respectivamente para el cálculo de las conductancias eléctrica y térmica [1]. Los resultados muestran que dentro del modelo de espina de pescado la conductancia eléctrica de los sistemas de ADN es insensible al orden cuasiperiódico, mientras que en la conductancia fonónica aparecen brechas en la transmitancia a medida que aumenta la longitud del sistema [2], lo que conduce a una mejora de la figura del mérito termoeléctrica de los sistemas cuasiperiódicos de ADN.

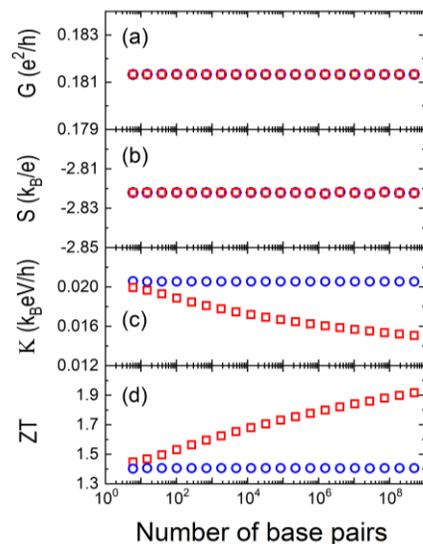


Fig. 1 Conductancia eléctrica (a), Coeficiente de Seebeck (b) Conductancia térmica K (c) y figura de mérito termoeléctrica ZT (d) de cadenas de ADN periódicas (círculos azules) y cuasiperiódicas (cuadrados rojos) como función del número de pares-base.

Referencias

- [1] J. E. González, V. Sánchez y C. Wang, MRS Communications **8**, 248-256 (2018).
[2] J. E. González, V. Sánchez y C. Wang, Journal of Electronic Materials **46**, 2724-2736 (2017).

Agradecimientos

Este trabajo ha sido parcialmente apoyado por CONACyT-252943, UNAM-PAPIIT-IN116317 y UNAM-PAPIIT-IN115519. Los cálculos se realizaron en Miztli de DG TIC-UNAM y en el laboratorio de computo de nanociencias del ESIME Culhuacan. JEG reconoce la beca postdoctoral de Sustentabilidad Energética Estancias Posdoctorales en México 2018 dentro del Fondo Sectorial CONACyT-Secretaría de Energía.

Estudio a primeros principios de las propiedades ópticas y vibracionales de carburo de silicio poroso

I. González, M. Calvino, A. Trejo*, M. Cruz-Irisson

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacan, Av. Santa Ana 1000 Col. San Francisco Culhuacan, 04440, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: alejandtb13@gmail.com

Palabras clave: Carburo de Silicio Poroso, función dieléctrica, DFPT

En los últimos años el carburo de silicio poroso (pSiC) se ha convertido en un material atractivo para aplicaciones en electrónica en condiciones de temperatura y frecuencia elevadas además de posibles aplicaciones en supercapacitores, sin embargo, existen muy pocos estudios teóricos sobre sus propiedades en especial sobre sus propiedades vibracionales y ópticas las cuales podrían ser de suma utilidad para sus implementaciones tecnológicas. En este trabajo se estudian las propiedades vibracionales y ópticas del pSiC poroso utilizando la teoría de perturbaciones del funcional de la densidad y la teoría del funcional de la densidad. Las estructuras porosas se modelaron al remover columnas de átomos de Si y C en la dirección [001] de la estructura del carburo de silicio cristalino mediante la técnica de superceldas [1]. La morfología se eligió de tal forma que la superficie de los poros se compusiera exclusivamente por átomos de Si (Rico en Si) o de C (Rico en C) y los enlaces sueltos de la superficie se pasivaron con átomos de hidrógeno. Se observaron diferencias notables en la estructura de bandas de fonones de las estructuras rica en Si respecto a la rica en C; mientras que en la estructura rica en Si la estructura de bandas genera solamente dos intervalos de frecuencias de vibración (una con vibraciones Si-Si y Si-H de doblez y otra con Si-H de estiramiento), la estructura Rica en C genera 3 (vibraciones C-C, C-H de doblez, y C-H de estiramiento). La función dieléctrica muestra una mayor actividad óptica de las estructuras ricas en Si debido a su menor brecha de energía. Estos resultados podrían ser de gran importancia para la aplicación y caracterización de estas estructuras con técnicas como por ejemplo espectroscopías infrarroja y Raman

Referencias

- [1] I. González, A. Trejo, M. Calvino, A. Miranda, F. Salazar, E. Carvajal y M. Cruz-Irisson, *Physica B* **550**, 420-427 (2018).

Agradecimientos

Este proyecto fue financiado por los proyectos 2018-1239 y 2019-0268 de SIP-IPN.

Oscilaciones de Rabi en sistemas elásticos 1D

W.J. Rodríguez Cruz, A. Díaz de Anda*

*Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, P.O. Box J-48, 72570,
Puebla, Pue., México.*

*Autor de correspondencia: williamr@ifuap.buap.mx

Palabras clave: Oscilaciones de Rabi, vibraciones torsionales

Un electrón inmerso en un sistema cuántico de dos niveles bajo la influencia de un campo electromagnético experimenta oscilaciones entre los dos niveles a la frecuencia de Rabi. Este comportamiento en respuesta al campo electromagnético se denomina oscilaciones de Rabi [1]. El comportamiento ondulatorio de este fenómeno permite su observación en sistemas clásicos más exactamente en acústica.

Estudiamos de forma numérica las oscilaciones de Rabi usando modos de vibración torsionales como un análogo a la ecuación de Schrödinger. En este trabajo se analizan vigas de sección transversal cilíndrica maquinadas en aluminio con una estructura que simula los dos niveles cuánticos mencionados arriba, emulados por la ubicación de dos impurezas dispuestas de forma simétrica a lo largo de la viga unidimensional. En el terreno numérico explotamos las ventajas del Método de la Matriz de Transferencia que nos permite calcular el espectro de frecuencias.

Referencias

[1] M. Fox (2005). Quantum optics an introduction. Oxford University Press.

Agradecimientos

Este trabajo está soportado por proyecto VIEP-BUAP, ID 00255

Viscosidad Efectiva en un Cristal Fonónico

M. A. Ibarias¹, J. Arriaga^{1*} y A. A. Krokhin²

¹Universidad Autónoma de Puebla, Instituto de Física, Apartado Postal J-48, Puebla, 72570 México,

²University of North Texas, Department of Physics, P.O. Box 311427, Denton, Texas 76203, USA,).

*Autor de correspondencia: arriaga@ifuap.buap.mx

Palabras clave: Cristal, Fonónico, Metamaterial, Acústico, Disipativo, Decaimiento

El decaimiento de la amplitud del sonido en agua pura es muy pequeño ($\sim e^{-\gamma x}$). Para una onda plana el coeficiente de decaimiento depende cuadráticamente de la frecuencia como $\gamma_0 = \frac{\omega^2(4\eta/3+\xi)}{2\rho_0 c_0^3}$ y es lineal sobre los coeficientes de primera y segunda viscosidad [1]. Incluso para frecuencias cerca de los 100kHz, la longitud de propagación $1/\gamma\gamma_0$ corresponde a muchos kilómetros. Por lo tanto la disipación puede ser fácilmente ignorada.

No obstante cerca de una frontera sólida, una capa viscosa es formada, donde la energía se disipa mucho más rápido que en un líquido. Cada reflexión en la frontera sólido-fluido está acompañada de pérdidas de energía de la escala $\sqrt{\eta\omega}$ [2] y las múltiples reflexiones incrementan fuertemente dichas pérdidas, entonces el cristal fonónico es un metamaterial disipativo.

Como las pérdidas por viscosidad son el principal factor que limita la eficiencia de dispositivos acústicos, es de gran interés desarrollar un método factible para el cálculo del coeficiente de decaimiento $\gamma\gamma$ o bien, desarrollar una expresión para la viscosidad efectiva de un cristal fonónico.

En un cristal fonónico compuesto por sólido-sólido la disipación puede ser descrita fenomenológicamente introduciendo la parte imaginaria del módulo de elasticidad de sus constituyentes [2]. Por otro lado, un enfoque microscópico basado en la ecuación de Navier-Stokes fue propuesto en [3], donde se estudia la dispersión del sonido en un arreglo de cilindros circulares en una red cuadrada y se analiza el efecto de la viscosidad en la sección transversal de dispersión.

En el presente trabajo se muestra un método analítico para el cálculo del coeficiente de decaimiento $\gamma = Q/2(c_{\text{eff}}E)$ en un cristal fonónico con capa viscosa fluido-sólido, en el límite de baja frecuencia, para cualquier red de Bravais y para una sección transversal arbitraria de cilindros.+

Referencias

- [1] L.D. Landau, and E.M. Lifshitz, Fluid Mechanics, 2nd Ed., Elsevier, Oxford, (1984).
- [2] L. M. Brekhovskikh and O. A. Godin, Acoustics of Layered Media I, 2nd Ed., Springer, (1998).
- [3] E. Reyes-Ayona, D. Torrent, and J. Sánchez-Dehesa, Homogenization theory for periodic distributions of elastic cylinders embedded in a viscous fluid, J. Acoust. Soc. Am. **132**, 2896 (2012).

Agradecimientos

Este trabajo fue realizado con el apoyo de EFRI No. 1741677 de la National Science Foundation y por Conacyt México bajo el apoyo A1-S-23120.

Eficiencia cuántica en compuestos luminiscentes con estructura cubica tipo Perovskita ($XZrO_3$, $X=Ba, Sr$)

R. I. López Esquivel^{1*}, J. G. Torres Morales², J. Guzmán Mendoza¹, T. Rivera Montalvo¹

¹ Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada (CICATA) del Instituto Politécnico Nacional, Legaria # 694, Miguel Hidalgo, 11500, Ciudad de México, México

² Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica (ESIME) del Instituto Politecnico Nacional, Avenida Santa Ana 951, San Francisco Culhuacan, Culhuacan CTM V, 04260 Ciudad de México.

*Autor de correspondencia: lopez_er@hotmail.com

Palabras clave: Perovskita, Eficiencia cuántica, Luminiscencia

En este trabajo se reporta la síntesis, caracterización, propiedades luminiscentes y eficiencia cuántica del zirconato de bario ($BaZrO_3$) y del zirconato de estroncio ($SrZrO_3$), los cuales presentan estructura cubica tipo perovskita de acuerdo a la formula $XZrO_3$. Se analizan los cambios en los espectros de emisión y en la eficiencia cuántica influenciados por el intercambio de los átomos bario y estroncio en la estructura cristalina. Los materiales fueron sintetizados por la vía hidrotermal a una temperatura de 200°C durante 120 minutos, usando cloruros como elementos precursores, agua desionizada como solvente e hidróxido de sodio para ajustar el pH. El análisis mediante difracción de rayos X (DRX) mostró que las estructuras cristalinas de $BaZrO_3$ y $SrZrO_3$ corresponden a la estructura cubica tipo perovskita, con grupo espacial Pm-3m, de acuerdo a las cartas de difracción #00-089-2486 y #00-089-9006 respectivamente. Mediante la ecuación de Scherrer se determinaron, a primera aproximación, los tamaños de cristal para ambos sistemas, obteniéndose un valor de 32 nm para el $BaZrO_3$ y 16 nm para $SrZrO_3$. Mediante Microscopia electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM) se observan nanocristales con un tamaño aproximado a 35 nm para el $BaZrO_3$ y de 20 nm para el $SrZrO_3$. Estas mediciones se corresponden con los datos obtenidos mediante DRX. El análisis mediante espectroscopia por dispersión de energía (EDS) no mostró elementos diferentes a los involucrados en el proceso de síntesis o elementos que se encuentren contaminando al material sintetizado. En la obtención de los espectros de emisión luminiscente se utilizaron longitudes de onda de excitación de 395 nm ($BaZrO_3$) y 394 nm ($SrZrO_3$). Los espectros de emisión presentan las bandas características rojo-naranja del ion europio producidas por las transiciones electrónicas ${}^5D_0 \rightarrow {}^7F_J$ ($J=0, 1, 2, 3$ y 4). Se observan corrimientos en energía en las transiciones electrónicas 7F_3 y 7F_4 y cambios en la eficiencia cuántica, debidos probablemente a la influencia del campo cristalino modificado por el intercambio entre los átomos de estroncio y zirconio.

Agradecimientos

Se agradece a: El CONACYT por su apoyo otorgado durante mis estudios doctorales, así como al Instituto Politecnico Nacional por su Programa Institucional de Formación de Investigadores (PIFI).

Estudio teórico de las propiedades estructurales, ópticas y electrónicas de dicalcogenuros de metales de transición

Miguel A. Hernández Vázquez.^{1*}, Andrés de Luna Bugallo¹ y R. Daniel Olguín Melo¹

¹CINVESTAV, Unidad de materiales, Libramiento Norponiente 2000, fraccionamiento Real de Juriquilla, c.p. 76230, Santiago de Querétaro, México.

*Autor de correspondencia: miguel.hernandezv@cinvestav.mx

Palabras clave: DMTs, LAPW

Dentro de los materiales bidimensionales se encuentra un subgrupo conocido como dicalcogenuros de metales de transición. Los dicalcogenuros de metales de transición (DMTs) son materiales que tienen la fórmula general MX_2 , donde M es un metal de transición de los grupos del 4 al 10 de la tabla periódica de los elementos químicos y X es un elemento de la familia de los calcógenos. Las interacciones entre los átomos M-X son predominantemente covalentes, mientras que las fuerzas de unión entre capas son interacciones de vander Waals y es por esta razón que también reciben el nombre de materiales van der Waals.

En este trabajo analizamos el comportamiento de las propiedades estructurales, ópticas y electrónicas de los DMTs al ir reduciendo el número de capas desde la forma en volumen hasta llegar al caso bidimensional (una monocapa), el estudio se realizó utilizando el método de ondas planas aumentadas y linealizadas (LAPW) con la aproximación del gradiente generalizado (GGA) implementado en el software WIEN2k. En cuanto a la parte electrónica se analizó las diferentes contribuciones de los orbitales del catión o anión a la estructura de bandas total, esto con el fin de tener una visión previa del sistema que podría tener mejores propiedades magnéticas para aplicaciones en espintrónica.

Referencias

- [1] Manish Chhowalla, Hyeon Suk Shin, Goki Eda, Lain-Jong Li, Kian Ping Loh, and Hua Zhang. The chemistry of two-dimensional layered transition metal dichalcogenide nanosheets. *Nature chemistry*, **5**(4):263–275, 2013.
- [2] Van Dyck, D. "Is the frozen phonon model adequate to describe inelastic phonon scattering?." *Ultramicroscopy* **109**(6) 677-682 (2009):.

Agradecimientos

Se agradece a: CONACYT y CINVESTAV-Querétaro por brindar el apoyo y financiación para la realización del proyecto, al laboratorio de matemáticas aplicada y cómputo de alto rendimiento del departamento de matemáticas por brindarnos el uso de la supercomputadora ABAQUS.

Análisis de una monocapa de siliceno vía primeros principios

I. F. Bedoya^{1,2*}, A. M. Reyes^{1,2}, J. A. Montoya³ y O. Navarro¹

¹Unidad Morelia, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. Ex Hacienda de San José de la Huerta, 58190 Morelia, Michoacán, México.

²Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo Facultad de Ciencias Físico- Matemáticas, Edif. Alfa Francisco J Mujica S/n, Morelia, México.

³Grupo de Modelado Computacional e Instituto de Matemáticas Aplicadas, Universidad de Cartagena, Cartagena de Indias 130001, Colombia.

*Autor de correspondencia: ivanlipe92@hotmail_

Palabras clave: Siliceno, densidad de estados, estructura de bandas, gap electrónico.

El silicio ha sido la base de los dispositivos electrónicos del último siglo, cubriendo un amplio rango de aplicaciones tecnológicas [1]. El siliceno, esta organizado en una estructura hexagonal (tipo grafeno) de átomos de silicio, es una monocapa semimetálica no magnética, con bandas electrónicas que se cruzan línealmente, además presenta características especiales como el efecto Hall cuántico de espín, un gap modificable mecánicamente y una interacción espín-orbita considerable [2]. En este trabajo se estudia una monocapa de siliceno, en especial sus propiedades electrónicas y fonónicas, con el fin de validar algunos métodos computacionales basados en la teoría del funcional de densidad, mediante la aproximación de gradiente generalizado. Encontramos un gap electrónico de 1.58 meV, las estructuras de bandas y densidades de estados electrónica y fonónica.

Referencias

- [1] T. Botari, E. Perim, P. A. S. Autreto, A. C. T. van Duin, R. Paupitz, and D. S. Galvao, Phys. Chem. Chem. Phys **16**, 19417–19423 (2014)
- [2] K. Takeda and K. Shiraishi, Phys. Rev. B **50**, 14916–14922 (1994).

Agradecimientos

Se agradece al proyecto No. 252677 de CONACyT y UNAM-PAPIIT-IN104616 (O. N.). I. F. B y A. M. R. a CONACyT por el apoyo económico.

Transporte eléctrico en multicapas Vitrovac/Oro/Ferromagnético suave

Enrique Francisco Pinzón Escobar*, A. Esparza García y Herlinda Montiel

Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Circuito Exterior S/N, Ciudad Universitaria, Ciudad de México, México.

* Autor de correspondencia: enrique.pinzon@icat.unam.mx

Palabras clave: espintrónica, magnetorresistencia, magnetoimpedancia.

Se realizó la caracterización eléctrica de heteroestructuras Vitrovac/Oro/ (Vitrovac/Permalloy/Niquel). Las heteroestructuras se obtuvieron mediante erosión catódica asistida por magnetrón, depositadas sobre sustrato de vidrio, el espesor de la película de Vitrovac sobre el sustrato fue de 31.25nm, 62.5nm y 125 nm, manteniendo constantes los espesores de la película de Oro a 5 nm y 31nm para la película ferromagnética depositada sobre Oro (ver figura 1). Se observan pequeños cambios en la magnetorresistencia como función de la orientación de la heteroestructura con el campo magnético, sugiriendo que el sistema es de baja anisotropía y definiendo un eje de fácil magnetización al variar el espesor del Vitrovac; este comportamiento es inducido por la anisotropía de forma. Por otra parte, mediante la excitación en corriente alterna a diferentes potencias con frecuencias entre 100kHz y 500MHz, se observan cambios en la impedancia debidos a fenómenos magnetoinductivos.

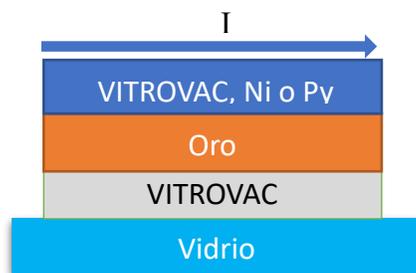


Fig. 1 Esquema de las heteroestructuras depositadas.

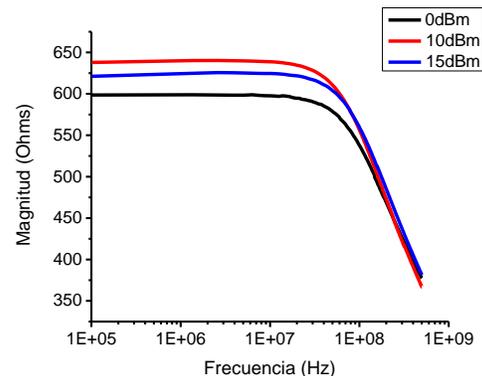


Fig. 2 Magnitud de impedancia eléctrica de estructura Vitrovac/Oro/Permalloy para distintas potencias de excitación.

Agradecimientos

Se agradece a: DGAPA-UNAM por su financiamiento mediante proyecto PAPIT No. IG100517

Formación de banda intermedia en una superred de pozos tipo delta de AlGaAs/GaAs

A. Del Río-De Santiago^{1,*}, K. A. Rodríguez-Magdaleno², J. C. Martínez-Orozco².

¹Unidad Académica de Ingeniería, Universidad Autónoma de Zacatecas. México

²Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina Paseo a La Bufa S/N. C.P. 98060, Zacatecas, Zac., México.

*Autor de correspondencia: adelrio22@gmail.com

Palabras clave: LDOS, Banda Intermedia, AlGaAs/GaAs.

En este trabajo calculamos la densidad de estados de una superred de pozos tipo delta GaAs/AlGaAs y reportamos la formación de una banda intermedia como función de varios parámetros, el más importante causado por el empalme de las funciones de onda de los pozos cuánticos que constituyen la superred. La forma de los pozos delta depende de la concentración de aluminio en cada una de las mono-capas, así como de las barreras que se encuentran entre los pozos a las cuales también es posible variar las alturas. Este trabajo se efectúa con el modelo Tight-Binding a primeros vecinos con los orbitales sp^3s^* incluyendo el espín. Encontramos que la posición relativa de la banda intermedia se puede manipular con la implementación de diferentes anchos y alturas de barreras intermedias, el número de pozos que constituyen en arreglo y la concentración de aluminio que determina la forma delta de los pozos cuánticos [1].

Referencias

[1] A. Del Río-De Santiago, J. C. Martínez-Orozco, K. A. Rodríguez-Magdaleno, D. A. Contreras-Solorio, I. Rodríguez-Vargas, F. Ungan. Superlattice. Microst. **115**, 191 (2018).

Estudio de las propiedades termoeléctricas en superredes aperiódicas construidas a base de siliceno

E.J. Guzmán^{1,2*}, O. Oubram³, O. Navarro¹ y I. Rodríguez-Vargas⁴

¹Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. Ex Hacienda de San José de la Huerta, 58190 Morelia, Michoacán, México.

²Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Avenida Francisco J. Múgica s/n, Ciudad Universitaria, 58030 Morelia, Michoacán, México.

³Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, México.

⁴Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad Esquina con Paseo La Bufa s/n, 98060 Zacatecas, Zacatecas, México.

*Autor de correspondencia: eric-gio@hotmail.com

Palabras clave: Termoelectricidad, Espintrónica, Seebeck, Siliceno.

La termoelectricidad en sistemas de baja dimensión ha demostrado la posibilidad de mejorar notablemente la eficiencia termoeléctrica a través de la redistribución de la densidad de estados causada por la reducción de la dimensionalidad de los dispositivos nanoestructurados. Recientes investigaciones en superredes electrostáticas aplicadas en novedosos materiales bidimensionales tales como grafeno y siliceno han mostrado una importante mejora de las propiedades termoeléctricas. En este trabajo, hemos investigado superredes aperiódicas aplicadas en una capa de siliceno. Las propiedades de transporte, en particular la transmisión y la conductancia fueron obtenidas usando el método de la matriz de transferencia y el formalismo de Landauer-Büttiker. Además, empleado la fórmula de Cutler-Mott hemos calculado el coeficiente de Seebeck y el factor de potencia. En nuestros resultados encontramos que el transporte electrónico se modifica enormemente cuando implementamos diferentes tipos de aperiodicidad. Mas aún, hemos observado que, en ciertos niveles de energía, la conductancia tiene un comportamiento oscilante más pronunciado en comparación con el caso periódico. Como consecuencia, hemos obtenido un notable incremento tanto de la magnitud como del número de picos del coeficiente de Seebeck y por lo tanto del factor de potencia. Concluimos que las superredes aperiódicas implementadas en siliceno podrían ser una excelente estrategia para mejorar la eficiencia termoeléctrica de los dispositivos a nano-escala.

Agradecimientos

Se agradece el apoyo subvencionado por el proyecto No. 252677 de CONACyT y el proyecto No. PAPIIT-IN105019 de la UNAM. El autor E.J. Guzmán agradece a CONACyT por la beca de Doctorado.

Cálculo de excitones en pozos cuánticos basados en nitruros con estructura zinc blenda

J. G. Rojas-Briseño¹, J. C. Martínez-Orozco¹ y M. E. Mora-Ramos^{2*}

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina con Paseo a la Bufa S/N, C.P. 98060, Zacatecas, Zacatecas, México.

²Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Cuernavaca, Morelos, México.

*Autor de correspondencia: jgrojas@fisica.uaz.edu.mx

Palabras clave: Excitones, Pico de fotoluminiscencia

Los semiconductores basados en nitruros han atraído la atención debido a las características que poseen, las cuales los hacen óptimos para la aplicación en dispositivos optoelectrónicos tales como diodos emisores de luz (LED's), entre otros. En este trabajo calculamos los estados de excitones, energías de enlace y pico de fotoluminiscencia en pozos simple y doble basados en nitruros con estructura zinc blenda. Trabajamos dentro de la aproximación de masa efectiva e implementamos el método variacional para obtener los estados de excitones. La estructura electrónica fue calculada considerando bandas independientes de huecos. Encontramos regiones de estados de excitones directos a indirectos dependiendo de la estructura que se analiza. Lo anterior se denota en los puntos máximos y mínimos de la energía de enlace. También mostramos el pico de fotoluminiscencia el cual es comparado con resultados experimentales.

Agradecimientos

La secretaria de educación pública y a la Universidad Autónoma de Zacatecas por la beca posdoctoral 511-6/18-12858.

Estructura cristalina del sistema $\text{Sr}_2\text{FeMo}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_6$

José Luis Rosas^{1*}, Jesús Alberto León-Flores¹, Eliel Carvajal², Raúl Escamilla¹ y Martín Romero²

¹Instituto de Investigaciones de Materiales - UNAM, A.P. 70-360, Ciudad de México, México

²Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica-Culhuacán - IPN, Av. Santa Ana 1000, 1440 Ciudad de México, México

³Facultad de Ciencias - UNAM, A.P. 70-399, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: joseluis_rosas@comunidad.unam.mx

Palabras clave: dobles perovskitas, estructura cristalina

Las aplicaciones en la que se involucran compuestos con estructura de perovskita doble son muy diversas: celdas de combustible de estado sólido y reversibles, catalizadores, fotocatalizadores, sensores de gas, etc.; de ahí que este tipo de compuestos sean ampliamente estudiados [1]. El sistema $\text{Sr}_2\text{FeMo}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_6$ resulta interesante debido a que presenta una transición de conductor a semiconductor para $x=0.0$ y 1.0 , respectivamente. Además, puede ser ferromagnético o antiferromagnético y exhibe una pérdida en el ordenamiento de los metales de transición cuando $x>0.7$. Así que se pueden modular las propiedades eléctricas y magnéticas a través de la concentración de Nb presente en el sistema [2, 3]. Sin embargo, éste sistema ha sido poco estudiado, por lo cual, en el presente trabajo se estudia la estructura cristalina del sistema $\text{Sr}_2\text{FeMo}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_6$ ($0.5 < x < 1.0$) mediante el refinamiento Rietveld de la estructura cristalina a través del método de Rietveld. Los resultados muestran un buen ajuste con la estructura $I4/m$ (grupo espacial no. 87) así como una disminución de los parámetros de red conforme aumenta el contenido de Mo (Fig. 1). Por otro lado, las mediciones de EDS permiten ver que se tiene una solución homogénea del sistema.

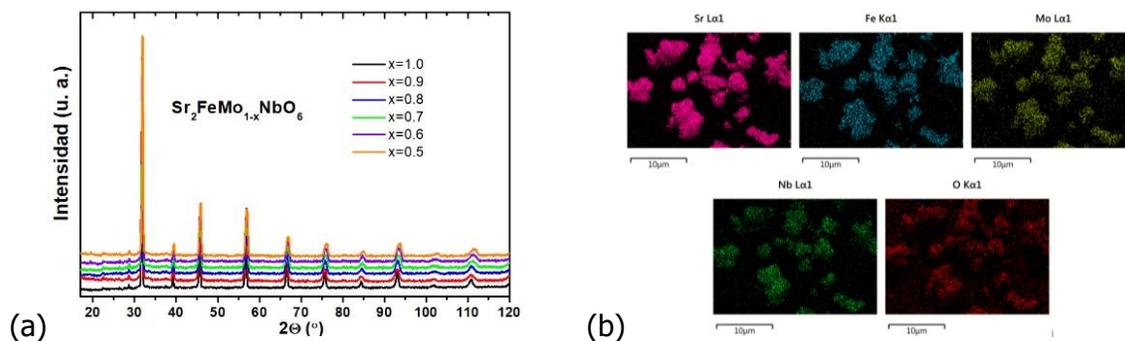


Fig. 1. (a) Rayos X de sistema $\text{Sr}_2\text{FeMo}_{1-x}\text{Nb}_x\text{O}_6$, (b) EDS para $x=0.7$

Referencias

- [1] T. Xia, *et al.*, *Journal of alloys and Compounds* **422**, 264 (2006).
- [2] B.-G. Park, *et al.*, *Physical Review B* **79**, 035105-1 (2009).
- [3] X. Zhao, *et al.*, *Materials Science and Engineering B* **111**, 101 (2004).

Agradecimientos

Este trabajo es parcialmente soportado por los proyectos DGAPA-UNAM IN106116/28, IN109718/30, IN115219 y IPN-SIP 20181937 y 20196659. José Luis Rosas y Jesús Alberto León-Flores agradecen la beca proporcionada por CONACyT.

Propiedades mecánicas y electrónicas de nanoalambres de carburo de estaño

Alma L. Marcos-Viquez^{1*}, Miguel Cruz-Irisson¹ y Luis A. Pérez²

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, 04430 Ciudad de México, México

²Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, 01000 Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: almalorenamarcos@gmail.com

Palabras clave: nanoalambres, carburo de estaño, teoría del funcional de la densidad.

En este trabajo, hacemos un estudio teórico de la estabilidad energética y de las propiedades mecánicas y electrónicas de nanoalambres de carburo de estaño (SnC). Para ello, se realizaron cálculos mecánico-cuánticos usando la Teoría del Funcional de la Densidad dentro de la aproximación del gradiente generalizado. En particular, estudiamos cinco diferentes diámetros, dos pasivaciones superficiales (hidrógeno y flúor), y dos diferentes direcciones cristalográficas de crecimiento, [001] y [111]. Discutimos los efectos del diámetro, la geometría y la pasivación química sobre el módulo de Young y la brecha energética de los diferentes nanoalambres estudiados [1,2].

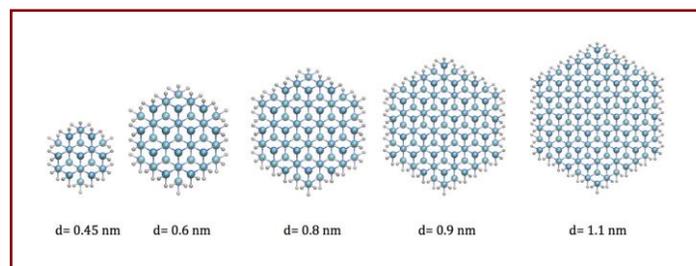


Fig. 1 Sección transversal de nanoalambres de SnC crecidos a lo largo de la dirección [111] con cinco diferentes diámetros y pasivados con hidrógeno. Las esferas azules claras, azules oscuras y blancas representan los átomos de estaño, carbono e hidrógeno, respectivamente.

Referencias

- [1] A. Miranda y L.A. Pérez, *Computational Materials Science* **111**, 294 (2016).
[2] F. Salazar y L.A. Pérez, *Computational Materials Science* **63**, 47 (2012).

Agradecimientos

Proyecto Multidisciplinario IPN-SIP 2018-1937; Proyectos Individuales IPN-SIP-2018-1239, 2018-1293; y UNAM-PAPIIT IN107717. Los cálculos fueron llevados a cabo en la supercomputadora Miztli DGTIC-UNAM (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180). A. M.V. agradece a CONACYT y BEIFI-IPN por la beca escolar.

Propiedades magnéticas y magnetodieléctricas de Ferrita de cobalto (CoFe_2O_4)

E. López Moreno^{1*}, H. Montiel¹ y G. Álvarez²

¹Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología, Circuito Exterior S/N, Ciudad Universitaria, A.P. 70-186, Coyoacán, C.P. 04510, Ciudad de México, México.

²Universidad Autónoma de la Ciudad de México, UACM-Cuauhtepac, Av. de la Corona 320, Loma de la Palma, 07160, Ciudad de México, Mexico.

*Autor de correspondencia: everardo.lopez@icat.unam.mx

Palabras clave: Ferrita de cobalto, espinela mixta, conductividad AC.

La ferrita de cobalto (CFO) es un óxido ferrimagnético con estructura espinela, alta anisotropía magnetocristalina cúbica, magnetostricción negativa y propiedades electrónicas de tipo aislante-semiconductor[1]. En este trabajo se obtiene CFO mediante el método de síntesis por coprecipitación química a 1000 °C, la cual presenta alta coercitividad (442 Oe) y magnetización de saturación (74.5 emu/g). Se confirma que la CFO posee una estructura espinela mixta con distribución catiónica $(\text{Co}_{0.38}\text{Fe}_{0.62})_{\text{Td}}[\text{Co}_{0.62}\text{Fe}_{1.38}]_{\text{Oh}}\text{O}_4$ determinado por espectroscopia Mössbauer a partir del análisis de campo magnético hiperfino (H_A) y corrimiento isomérico (IS). Se caracteriza la respuesta de impedancia en el intervalo de frecuencia de 30 KHz a 30 MHz con campo magnético DC de 0.3.63 KOe, los datos de impedancia fueron ajustados considerando una conexión en serie de elementos resistivo-capacitivo asociados a la respuesta eléctrica en regiones granulares y fronteras de grano [2]. Se analiza la permitividad dieléctrica, conductividad eléctrica AC y se discute el mecanismo de conducción en términos de sus propiedades estructurales y magnéticas.

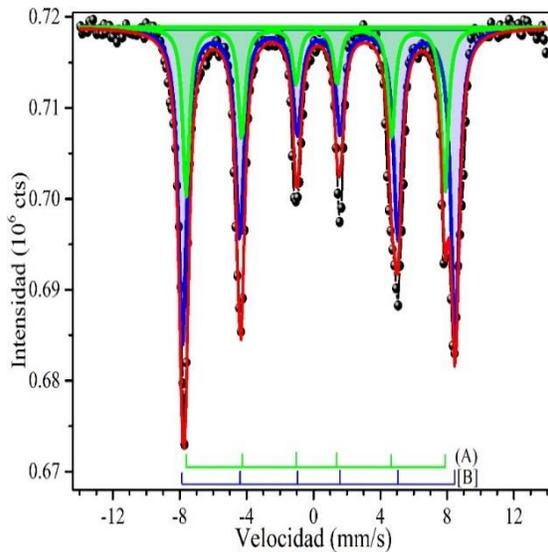


Fig. 1 Deconvolución de espectro Mössbauer de ferrita de cobalto.

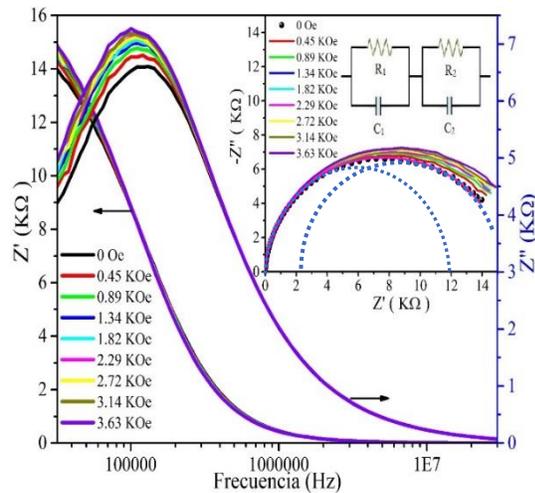


Fig. 2 Espectro de Impedancia real Z' e imaginaria Z'' en frecuencia ante campo magnético DC.

Referencias

- [1] G.H. Jonker, *J. Phys. Chem. Solids*, **9**, 165-175 (1959).
- [2] J.T.S. Irvine, D.C. Sinclair, A.R. West, *Electroceramics: Characterization by Impedance Spectroscopy*, *Adv. Mater.* **2**, 132–138 (1990).

Agradecimientos

Se agradece a: DGAPA-UNAM por el soporte económico brindado mediante el proyecto de investigación PAPIIT IG100517. Agradecimientos al Dr. Agustín Conde Gallardo (CINVESTAV-IPN) y al M. José Luis Pérez Mazariego (Facultad de Ciencias-UNAM) por su apoyo en las mediciones magnéticas mediante magnetometría de muestra vibrante y espectroscopía Mössbauer, respectivamente.

Perovskita haluro de germanio $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$

E. Zúñiga*, D. P. Fernández, F. Salazar, E. Carvajal

Intituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, 04430, Ciudad de México, México.

*Autor de correspondencia: eduardo.zuniga.gin2017@gmail.com

Palabras clave: Perovskita, germanio, plomo.

En los últimos años, se ha logrado incrementar la eficiencia de los sistemas fotovoltaicos recurriendo a las perovskitas; particularmente, utilizando el compuesto $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ [1]. Sin embargo, la presencia del Pb genera inquietudes y eso representa un problema; además, hay otros retos por superar, destacando la interacción con el ambiente sin generación de compuestos contaminantes y la eliminación de inestabilidades frente a la humedad. En este trabajo se presenta una investigación teórica de las propiedades electrónicas del $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{GeI}_3$, en bulto; se ha hecho una sustitución homovalente del plomo por el germanio y, posteriormente, se ha reemplazado el catión orgánico con Cs o $\text{HC}(\text{NH}_2)_2$. La motivación para realizar las sustituciones mencionadas radica en los reportes de las propiedades electrónicas reportadas y la posibilidad de comparar con los resultados experimentales y teóricos realizados para la perovskita con plomo [2]. La finalidad es demostrar que el germanio permitirá lograr propiedades más aptas, que las logradas con el compuesto con plomo, para el transporte electrónico; además, el germanio representa una sustitución viable para eliminar los posibles efectos contaminantes [3]. Los cálculos para los modelos propuestos fueron realizados en el marco de la teoría del funcional de la densidad.

Referencias

- [1] S. Il Seok, G. Michael y P. Nam-Gyu, «Methodologies toward Highly Efficient Perovskite Solar Cells,» *Small*, p. 17, 2018.
- [2] C. C. Stoumpos, L. Frazer, D. J. Clark, Y. S. Kim, S. H. Rhim, A. J. Freeman, J. B. Ketterson, J. I. Jang y M. G. Kanatzidis, «Hybrid Germanium Iodide Perovskite Semiconductors: Active Lone Pairs, Structural Distortions, Direct and Indirect Energy Gaps, and Strong Nonlinear Optical Properties,» *Journal of the american chemical society*, p. 16, 2015.
- [3] S. Ping-Ping, C. Wei-Jie y L. Ze-Sheng, «Effects of water molecules on the chemical stability of MAGEI3 perovskite explored from a theoretical viewpoint,» *Royal Society of Chemistry*, p. 11, 2016.

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado parcialmente por los proyectos SIP 20181937 y 20196659. E. Zúñiga y D. P. Fernández agradecen el apoyo del CONACYT (beca de posgrado) y del programa BEIFI del IPN

Heteroestructuras nanométricas de Si/LaTiO₃

J. M. Cervates¹, E. Zúñiga¹, R. Oviedo-Roa², E. Carvajal^{1*}, E. Alva¹

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, 04440, Ciudad de México, México

² Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, 07730, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: eliel.carvajal@gmail.com

Palabras clave: sistemas confinados, baterías de iones de litio, estructura tipo perovskita

El interés por estudiar óxidos con estructura tipo perovskita ha crecido enormemente, debido a que las propiedades físicas que exhiben son múltiples y esto permite que se utilicen en una gran variedad aplicaciones tecnológicas (por ejemplo, como electrolito en las baterías de iones de litio). Particularmente, las propiedades electrónicas y magnéticas pueden ser controladas mediante el confinamiento cuántico o el crecimiento de dicho material sobre sustratos semiconductores con estructura tipo diamante [1]. También se han sintetizado nanoalambres semiconductores sobre sustratos con estructura tipo perovskita [2]. Sin embargo, hasta donde sabemos, no hay trabajos teóricos enfocados a estudiar el origen de las propiedades electrónicas y magnéticas de heteroestructuras nanoestructuradas 1D/2D; específicamente compuestas por nanoalambres semiconductores de Si (NA-Si) depositados sobre una capa delgada de LaTiO₃ con estructura tipo perovskita. Así que, en este trabajo, se estudia la estabilidad energética y las propiedades electrónicas y magnéticas de sistemas compuestos por un NA-Si depositado sobre un sustrato de LaTiO₃. El estudio fue realizado dentro del marco de la Teoría de las Funcionales de la Densidad, en la Aproximación de la Densidad Local, usando el parámetro de Hubbard. Los resultados muestran cambios estructurales debidos a la interacción NA/sustrato: la sección transversal de los nanoalambres cambia, sin importar la magnitud del diámetro. Sin embargo, la densidad electrónica de los NA-Si (enlaces Si-Si) es similar a la correspondiente al NA aislado; esto podría indicar que hay poca transferencia de carga entre los NA-Si y la capa delgada de LaTiO₃. Todos los sistemas se comportan como materiales ferrimagnéticos y, en particular, los sistemas con NAs con mayor diámetro presentan momentos magnéticos distribuidos sobre los átomos del sustrato: conforme aumenta el diámetro de los NA, se inhiben las propiedades magnéticas del NA semiconductor. Los sistemas acoplados NA/sustrato, con los NA-Si de menor diámetro, se comportan como metales. A medida que aumenta el diámetro, el sistema puede ser un medio-metal o un semiconductor, dependiendo de la orientación del NAs sobre el sustrato.

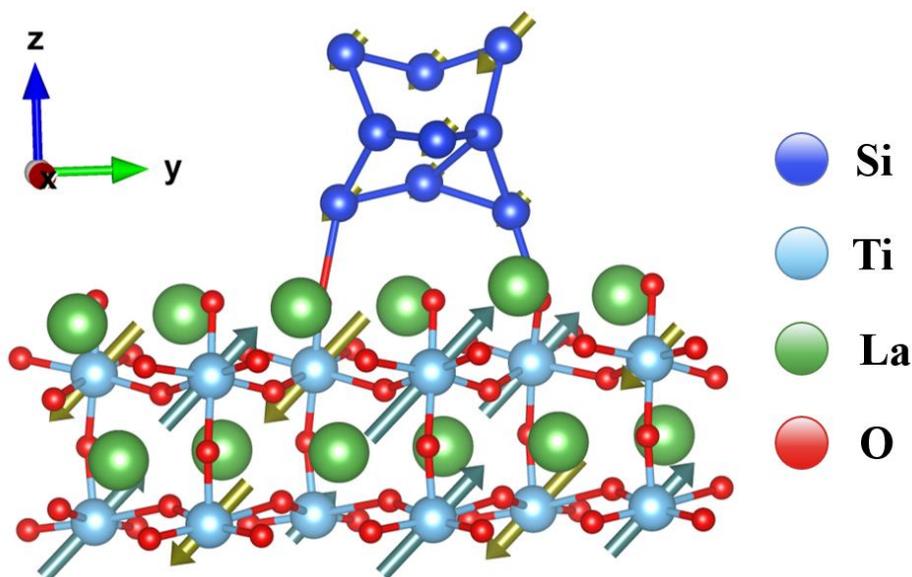


Fig. 1. Heteroestructura nanométrica NA-Si/LaTiO₃. El NA-Si tiene el menor diámetro modelado y está orientado de tal forma que resulta periódico a lo largo de la dirección cristalográfica [100]. Las flechas indican el momento magnético total de las especies atómicas.

Referencias

- [1] M. Dogan and S. Ismail-Begi, *Physical Review B* **96** (2017) 1-14.
 [2] Y. Liang, C. Hu and H. Zhong, *Applied Surface Science* **261** (2012) 633-639.

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por el proyecto multidisciplinario IPN-SIP-2019-6659. J. M. Cervantes agradece el apoyo del CONACYT.

Propiedades optoelectrónicas de un pozo doble asimétrico de AlGaAs/GaAs en presencia de un campo electromagnético

R. González-Reyes^{1,*}, A. Puga-Candelas¹, J. C. Martínez-Orozco¹

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina Paseo a La Bufa S/N. C.P. 98060, Zacatecas, Zac., México.

*Autor de correspondencia: rebeca.gonzalez@fisica.uaz.edu.mx

Palabras clave: Heteroestructura cuántica AlGaAs/GaAs, Campo electromagnético, Coeficiente de absorción, Cambio de índice de refracción.

Presentamos el estudio del confinamiento de un electrón en una heteroestructura de AlGaAs/GaAs formada por dos pozos cuánticos rectangulares en presencia simultánea de un campo eléctrico (en la dirección de crecimiento z) y un campo magnético constante (en la dirección x). La estructura electrónica se calcula trabajando en la aproximación de masa efectiva, considerando los casos en que el sistema sea simétrico y asimétrico. Se resuelve la ecuación de Schrödinger numéricamente por el método de diagonalización que nos permite alcanzar el objetivo de este trabajo, el cual es analizar el comportamiento de las densidades de probabilidad y las funciones de onda, en particular de los primeros niveles de energía. También se presenta, a diferentes magnitudes de campo eléctrico y campo magnético, el comportamiento de la estructura electrónica y de propiedades ópticas, lineales y no lineales, tales como el coeficiente de absorción y el cambio de índice de refracción.

Coeficiente de absorción en un pozo cuántico delta doble dopado tipo n

H Noverola-Gamas^{1,2*}, LM Gaggero Sager³ y O Oubram⁴

¹Universidad Autónoma del Estado de Morelos 1, Instituto de Investigaciones en Ciencias Básicas y Aplicadas 1, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, Cuernavaca, México.

²Universidad Autónoma del Estado de Morelos 1, Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, Cuernavaca, México.

³Universidad Autónoma del Estado de Morelos 1, Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, Cuernavaca, México.

*Autor de correspondencia: noverola86@gmail.com

Palabras clave: Propiedades ópticas, Pozos cuánticos delta dopados, aproximación Thomas Fermi.

El principio de superposición es uno de los principios fundamentales en la Física, sin embargo en algunos casos no puede ser empleado. En el marco de la aproximación de Thomas-Fermi [1] hemos desarrollado una expresión matemática que modela el perfil de potencial en un sistema delta dopado doble en GaAs tipo n. En este trabajo hemos calculado las energías propias, autofunciones y la energía de Fermi para este sistema. Particularmente hemos calculado el coeficiente de absorción óptico intersubbanda como función de la distancia de separación entre capas dopantes. En este sentido hemos encontrado un corrimiento al rojo para el coeficiente de absorción a medida que la distancia de separación entre capas es mayor. Además, un mejoramiento en la amplitud se puede lograr con cambios en la distancias intercapas y la densidad de impurezas ionizadas.

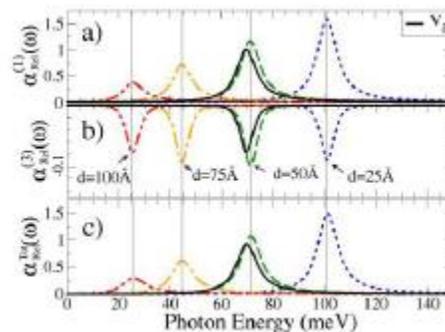


Fig. 1 Coeficiente de absorción a) lineal b) no lineal c) total para diferentes distancias de separación intercapas. La densidad de impurezas bidimensional es $N_{2D}=5 \times 10^{12} \text{cm}^{-2}$.

Referencias

[1] Lundqvist, S, March NH. Theory of the Inhomogeneous Electron Gas. 1983, Plenum, New York.

Detección de gases tóxicos a través de nanoestructuras de silicio

José Eduardo Santana^{*a}, Francisco de Santiago^a, Álvaro Miranda^a, Alejandro Trejo^a,
Rubén Vázquez-Medina^b, Luis Antonio Pérez^c, Miguel Cruz-Irisson^a

^aInstituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, Ciudad de México C.P. 04440, México

^bInstituto Politécnico Nacional, Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, Cerro Blanco 141, Colinas del Cimatarío, 76090 Querétaro, México

^cInstituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, 01000 Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: eduardo.santana.gin.2017@gmail.com

Palabras clave: Silicio poroso, Sensores, nanoalambres

Las nanoestructuras porosas tienen una gran superficie, la cual es conveniente para la adsorción de gases, sin embargo, los efectos de su cuasi-confinamiento cuántico en su capacidad de detección molecular no se ha estudiado lo suficiente [1,2]. En este trabajo se investiga la capacidad de detección de gases moleculares en nanoporos de silicio (pSi) y su comparación con nanoalambres de silicio (SiNW), los cálculos numéricos se llevaron a cabo por medio de la Teoría de Funcionales de la Densidad. En particular, la detección de moléculas de gases tóxicos CO, NO, SO₂ y NO₂ en ambas nanoestructuras (pSi y SiNW) se estudió sobre la misma superficie y sitio de adsorción (Figura 1). Los resultados muestran que las propiedades de adsorción y transferencia de carga relacionadas con la detección son muy similares, lo que sugiere que los efectos de superficie son predominantes sobre el efecto de confinamiento. Sin embargo, hay ciertos casos en los que hay diferencias notables entre los casos de pSi y SiNW, por ejemplo, el CO adsorbido en pSi muestra una estructura de bandas metálica a diferencia de su contraparte adsorbida en SiNW, que sigue siendo un semiconductor, además de cambios importantes en la estabilidad energética y las propiedades electrónicas, lo que sugiere que el cuasi-confinamiento cuántico puede estar jugando un papel importante en estos comportamientos. Estos resultados son significativos en el estudio de los fenómenos cuánticos detrás de la adsorción de moléculas de gas sobre las superficies de las distintas nanoestructuras, con posibles aplicaciones en sensores químicos o catalizadores [3]

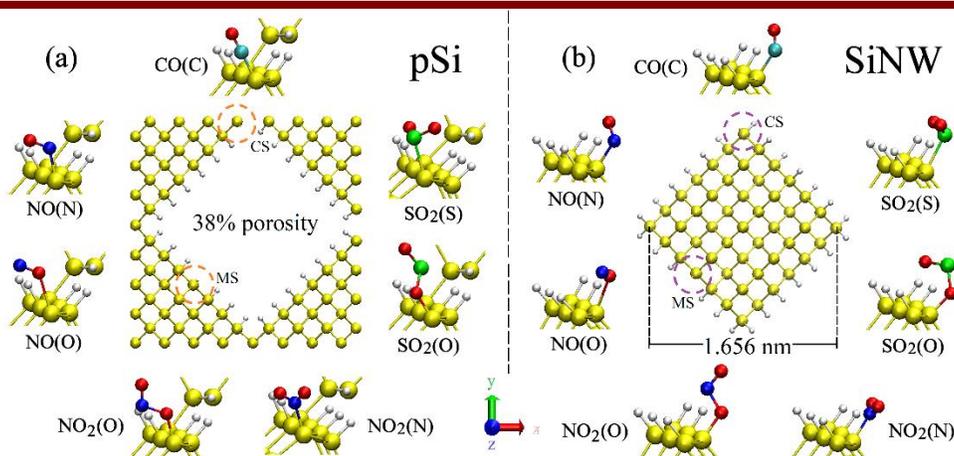


Figura 1. Sección transversal de las nanoestructuras de Si hidrogenadas. Panel izquierdo (derecho): silicio poroso -pSi (nanoalambre de silicio, SiNW). Los sitios de adsorción para las moléculas están marcados por círculos. Se indican las configuraciones para la adsorción de CO, NO, SO₂ y NO₂ sobre la superficie de silicio. Las esferas amarillas, azules, blancas, rojas, azules y verdes representan átomos de Si, H, C, O, N y S, respectivamente [3].

Referencias

- [1] F. de Santiago, A. Trejo, A. Miranda, F. Salazar, E. Carvajal, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Carbon monoxide sensing properties of B-, Al- and Ga-doped Si nanowires, *Nanotechnology* **29**, 204001 (2018).
- [2] F. de Santiago, A. Miranda, A. Trejo, F. Salazar, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson, and L.A. Pérez Quantum confinement effects on the harmful-gas-sensing properties of silicon nanowires, *International Journal of Quantum Chemistry* **118**, e25713 (2018).
- [3] F. de Santiago, J.E. Santana, Á. Miranda, A. Trejo, R. Vázquez-Medina, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Quasi-one-dimensional silicon nanostructures for gas molecule adsorption: a DFT investigation, *Applied Surface Science* **475**, 278-284 (2019).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por Proyectos Multidisciplinarios SIP-IPN 2016-1770 y 2018-1937; y UNAM-PAPIIT IN107717. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC UNAM. (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180), en supercomputadora Abacus-I de CINVESTAV-EDOMEX, y en la supercomputadora Xiuhcoatl de CINVESTAV (Proyecto LANCAD). J.E.S. y F.S. agradecen al CONACYT y BEIFI-IPN por sus becas.

Propiedades electrónicas de la monocapa de carburo de germanio decorada con átomos alcalinos

Héctor Muñoz*, Gerardo A. Galicia, Álvaro Miranda

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, CP 04440, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: hector.munoz.gin.2018@gmail.com

Palabras clave: Monocapa, Carburo de germanio, Metales alcalinos, Metales

Recientemente, la monocapa de carburo de germanio (M-GeC), análoga al grafeno, ha atraído la atención de la comunidad científica debido a sus interesantes propiedades estructurales, ópticas y electrónicas. En este trabajo se estudió la adsorción de metales alcalinos (Li, Na y K) en una M-GeC modelada a través del modelo de superceldas con una supercelda de 5×5 (Figura 1) [1,2], en el marco de la Teoría de las Funcionales de la Densidad. Los metales alcalinos fueron adsorbidos en los sitios arriba (T), abajo (D), puente (B) y hexagonal (H) de la M-GeC (Figura 2.a). Las energías de adsorción son similares a los obtenidos en grafeno debido a que la interacción entre los átomos de metal y la monocapa es más pequeña que la energía de cohesión de los átomos metálicos en bulto. Los átomos de Li y K se adsorben preferentemente sobre el átomo de Ge (sitio T), mientras que Na se adsorbe en el enlace entre C y Ge (sitio B). Las estructuras de bandas y densidad de estados electrónicos (Figura 2.b) nos indican que la adsorción de los metales alcalinos no modifica la naturaleza de la brecha semiconductor, sin embargo, la magnitud de la brecha de energía disminuye. Los resultados indican que la adsorción de átomos metálicos podría tener aplicaciones en sensores, almacenamiento de H y en baterías de iones de Li, Na y K.

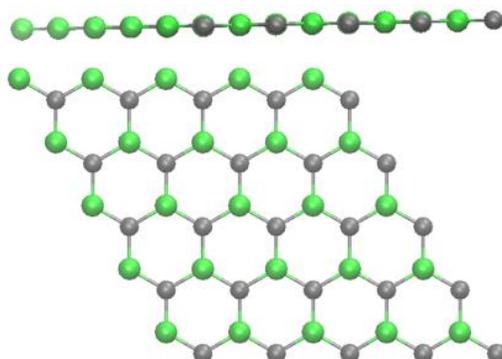


Figura 1. Representación de la supercelda de 5×5 de una monocapa de carburo de germanio con la vistas lateral y superior.

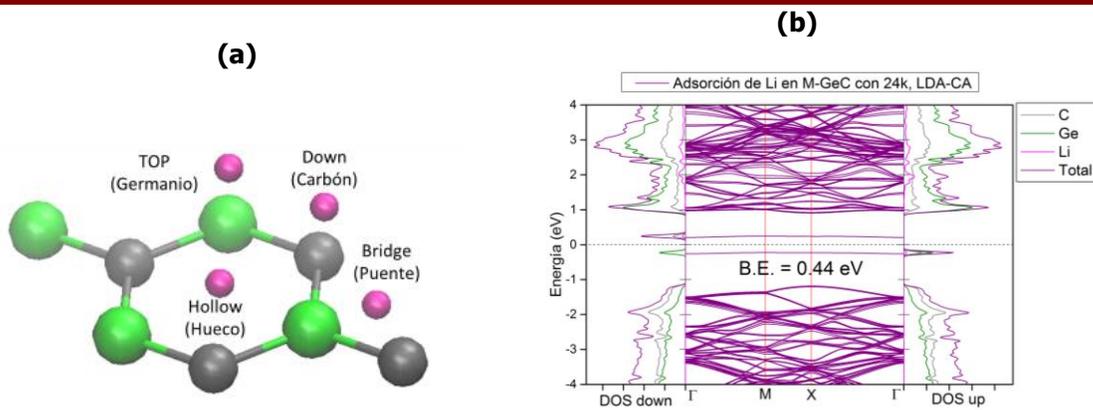


Figura 1. (a) Se representan los sitios de adsorción T, D, H y B. Las esferas verdes, grises y moradas representan al Ge, C y metales adsorbidos, respectivamente. (b) Se muestran las estructuras de bandas y densidad de estados electrónicos de la adsorción de un átomo de Li en la monocapa de GeC.

Referencias

- [1] F. de Santiago, A. Trejo, A. Miranda, F. Salazar, E. Carvajal, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Carbon monoxide sensing properties of B-, Al- and Ga-doped Si nanowires, *Nanotechnology* **29**, 204001 (2018).
- [2] F. de Santiago, J.E. Santana, Á. Miranda, A. Trejo, R. Vázquez-Medina, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Quasi-one-dimensional silicon nanostructures for gas molecule adsorption: a DFT investigation, *Applied Surface Science* **475**, 278-284 (2019).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por Proyectos Multidisciplinarios SIP-IPN 2016-1770 y 2018-1937. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC UNAM. (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180), en supercomputadora Abacus-I de CINVESTAV-EDOMEX, y en la supercomputadora Xiuhcóatl de CINVESTAV (Proyecto LANCAD). H.M. y G.A.G. agradecen al CONACYT y BEIFI-IPN por sus becas.

Nanoalambres de diamante como sensores de moléculas de CO

Ángel Daniel de la Merced*, Francisco de Santiago, Álvaro Miranda y Fernando Salazar

*Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000,
C. P. 04440, Ciudad de México, México*

*Autor de correspondencia: daniel.delamerced.gin2017@gmail.com

Palabras clave: Nanoalambres, Sensores, Diamante

Los nanoalambres de diamante (DNWs) podrían ser considerados como sensores debido a su gran relación volumen-superficie y su posible integración a dispositivos de estado sólido [1,2]. Recientemente, la detección de gases tóxicos como CO ha sido estudiada experimentalmente en DNWs dopados con boro [3]. En el presente trabajo se estudia, dentro del marco de la teoría del funcional de la densidad, la adsorción superficial de CO, NO, N₂, y O₂ en DNWs pasivados con hidrógeno y dopados con boro, aluminio y galio. Todos los DNWs estudiados se modelan en la dirección cristalográfica [111] (Figura 1). Los resultados indican que la molécula de CO está fuertemente adsorbida en los DNWs dopados, en comparación con los DNWs sin dopar. Las transferencias electrónicas de carga entre los DNWs y las moléculas adsorbidas fueron estimadas mediante el análisis de población de Voronoi. La molécula de CO adsorbida en los DNWs dopados con boro, aluminio y galio exhiben un comportamiento donador de electrones, mientras que la molécula de CO adsorbida en los DNWs sin dopar tiene un comportamiento aceptor, esto fue corroborado mediante la diferencia de densidad de carga. La comparación de las energías de adsorción para las moléculas de CO, NO, N₂, y O₂ indican que la mayor energía corresponde a la adsorción de CO en los DNWs dopados con B. Esto indica una adsorción preferencial y, por lo tanto, selectividad hacia la molécula de CO. Los resultados sugieren que los DNWs podrían ser incorporados en los sensores de gas y preservar la seguridad de las personas en situaciones de riesgo de intoxicación.

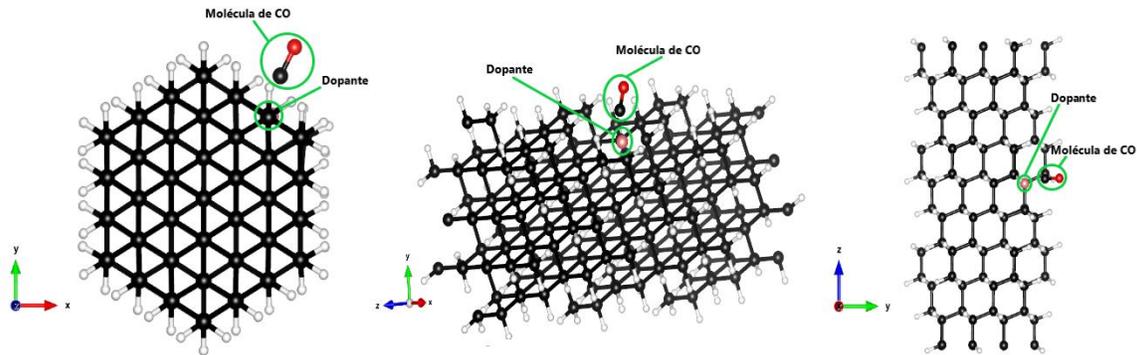


Figura 1. Nanoalambre de carbono con estructura tipo diamante crecido en la dirección cristalográfica [111] interactuando con una molécula de CO.

Referencias

- [1] F. de Santiago, A. Trejo, A. Miranda, F. Salazar, E. Carvajal, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Carbon monoxide sensing properties of B-, Al- and Ga-doped Si nanowires, *Nanotechnology* **29**, 204001 (2018).
- [2] F. de Santiago, J.E. Santana, Á. Miranda, A. Trejo, R. Vázquez-Medina, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Quasi-one-dimensional silicon nanostructures for gas molecule adsorption: a DFT investigation, *Applied Surface Science* **475**, 278-284 (2019).
- [3] X. Peng, J. Chu, L. Wang, Sh. Duan, P. Feng, Boron-doped diamond nanowires for CO gas sensing application, *Sensors and Actuators B: Chemical* **241**, 383-389 (2017).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por Proyectos Multidisciplinarios SIP-IPN 2016-1770 y 2018-1937; y UNAM-PAPIIT IN107717. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC UNAM. (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180), en supercomputadora Abacus-I de CINVESTAV-EDOMEX, y en la supercomputadora Xiuhcóatl de CINVESTAV (Proyecto LANCAD). A.D.M. y F.S. agradecen al CONACYT y BEIFI-IPN por sus becas.

Propiedades magnéticas de una monocapa de ZnO dopada con átomos de B, N y vacancias

Lorenzo A. López, Francisco de Santiago, Álvaro Miranda

Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, C.P. 04440, Ciudad de México, México

* Autor de correspondencia: lorenzo.lopez.gin2017@gmail.com

Palabras clave: ZnO, Monocapa, Vacancias, Dopaje

El ZnO ha sido investigado por parte de la comunidad científica en las últimas décadas debido a sus propiedades semiconductoras aplicables en dispositivos de estado sólido. En el presente trabajo se investigaron los efectos de monovacancias y divacancias en las propiedades electrónicas y magnéticas de una monocapa de ZnO con una supercelda de 5×5 [1,2], así como el dopaje con boro y nitrógeno (figura 1). Las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas fueron estudiadas usando la Teoría del Funcional de la Densidad. Los resultados muestran que la sustitución de un átomo de B o N por un átomo de O son más favorables energéticamente en comparación cuando se sustituye en un átomo de Zn; por otra parte la doble sustitución de dos átomos de B o N por un par Zn-O, presenta una mayor estabilidad energética en comparación con el dopaje de un solo átomo. Las propiedades electrónicas y magnéticas calculadas revelan que la monocapa pristine es no magnética. La sustitución de B o N por O resulta ferromagnética-semiconductora mientras que la doble sustitución de B o N en el par Zn-O son no magnética-semiconductora. Por otro lado existe un gran contraste en la sustitución de B y N por Zn, siendo en el primer caso no magnético mientras que en el segundo es ferromagnética semimetálica. En la mayoría de los casos las monocapas semiconductoras fueron tipo-*n*. La figura 2, muestra las gráficas de densidad de carga que proporcionan una idea de las interacciones que ocurren entre las especies atómicas.

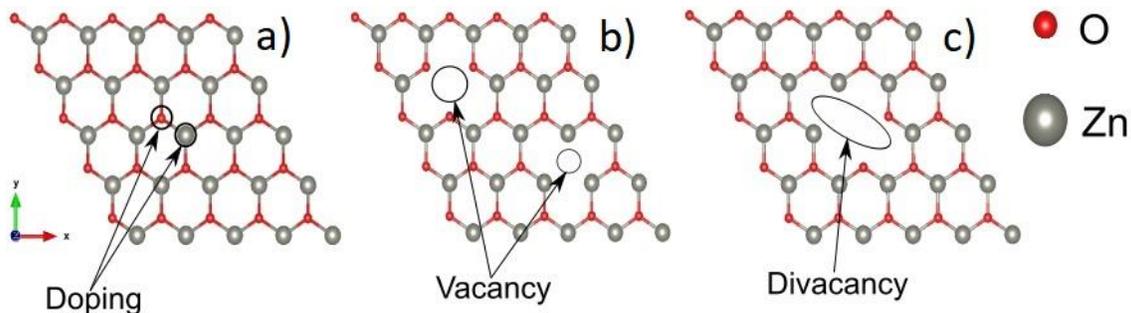


Figura 1. Defectos realizados en la monocapa de ZnO. (a) Dopaje sustitucional, (b) Monovacancia en O o Zn y (c) Divacancia del Zn-O.

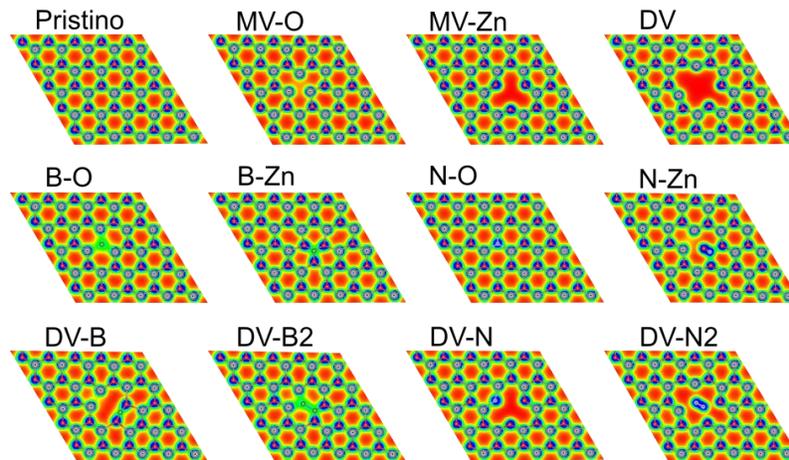


Figura 2. Densidad de carga de la monocapas de ZnO en diferentes configuraciones de vacancias, dopaje y vacancia-dopaje. Las áreas en color verde y rojo indican exceso y deficiencia de carga.

Referencias

- [1] F. de Santiago, A. Trejo, A. Miranda, F. Salazar, E. Carvajal, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Carbon monoxide sensing properties of B-, Al- and Ga-doped Si nanowires, *Nanotechnology* **29**, 204001 (2018).
- [2] F. de Santiago, J.E. Santana, Á. Miranda, A. Trejo, R. Vázquez-Medina, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Quasi-one-dimensional silicon nanostructures for gas molecule adsorption: a DFT investigation, *Applied Surface Science* **475**, 278-284 (2019).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por Proyectos Multidisciplinarios SIP-IPN 2016-1770 y 2018-1937. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC UNAM, en supercomputadora Abacus-I de CINVESTAV-EDOMEX, y en la supercomputadora Xiuhcóatl de CINVESTAV (Proyecto LANCAD). L.A.L. y F.S. agradecen al CONACYT y BEIFI-IPN por sus becas.

Estudio de propiedades ópticas no lineales en pozos cuánticos escalonados dobles en GaAs/AlGaAs

B. E. Maldonado-Villa*, **K. A. Rodríguez-Magdaleno**, **J. C. Martínez-Orozco**

Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina Paseo a La Bufa S/N. C.P. 98060, Zacatecas, Zac., México.

*Autor de correspondencia: belen.maldonado@fisica.uaz.edu.mx

Palabras clave: Coeficiente de Absorción, AlGaAs, Presión hidrostática.

Los pozos cuánticos de semiconductores III-V, en particular de AlGaAs/GaAs, son heteroestructuras cuánticas que poseen propiedades interesantes en la búsqueda de diseñar dispositivos electrónicos y ópticos mas confiables y eficientes. En específico, los pozos cuánticos dobles presentan una fenomenología interesante ya que, como función de los anchos de los pozos, la barrera central o de la altura de las barreras adyacentes, permiten sintonizar una gran cantidad de propiedades físicas con potenciales aplicaciones. De hecho, el comportamiento de la estructura electrónica depende además de factores externos como: campos eléctricos y magnéticos. En este trabajo, se estudia el efecto que tiene la presión hidrostática (en un rango de 0 a 40 kbar) y el campo eléctrico aplicado en la dirección de crecimiento, sobre la estructura electrónica y en el coeficiente de absorción óptica intersubbanda. El cálculo de las propiedades de interés se realiza dentro de la aproximación de masa efectiva considerando las dependencias con la presión hidrostática en la masa efectiva, la constante dieléctrica relativa, así como en los anchos del sistema y en las alturas de las barreras de potencial, el término del campo eléctrico se considera directamente en el Hamiltoniano del sistema. Se encuentra, que el efecto general de la presión hidrostática presenta una disminución en las alturas de las barreras, así como en los anchos de los pozos, lo cual produce un ligero corrimiento al rojo en el coeficiente de absorción y que el campo eléctrico permite sintonizar en diferentes regiones la posición del pico resonante.

Análisis de la estabilidad dinámica y las propiedades electrónicas de monocapas de sulfuro de cadmio

Antony F. López*, Ricardo Bermeo, Alejandro Trejo, Fernando Salazar, Miguel Cruz-Irisson.

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Anna 1000, C. P. 04440, Cd. de México, México.

*Autor de correspondencia: antony.lopez.gin2017@gmail.com

Palabras clave: CdS, monocapas, calcogenuros.

Actualmente los materiales bidimensionales (2D) han atraído gran interés debido a sus propiedades electrónicas y ópticas, el sulfuro de cadmio es un material prometedor para una gran gama de aplicaciones tecnológicas, tales como: electrónica, optoelectrónica, sensores, como capa buffer en dispositivos fotovoltaicos y catalizadores, etc. [2]. En este trabajo se exploran las propiedades electrónicas y vibracionales de estructuras 2D de CdS mediante cálculos basados en el enfoque de la teoría de los funcionales de la densidad (DFT). Partiendo de la estructura cristalina tipo Zinc Blenda se construyó la monocapa realizando un corte sobre el plano cristalográfico [111], utilizando la técnica de superceldas [1,2] posteriormente se determinó la estructura geométrica de menor energía y las propiedades electrónicas, a través de la aproximación de gradiente generalizado (GGA) con el funcional Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Para la estabilidad dinámica (dispersión de fonones) de la monocapa de CdS se calculó la estructura de bandas fonónicas. Los resultados muestran que el CdS conserva una brecha directa de energía y que la monocapa es estable debido a la ausencia de modos negativos en la dispersión de fonones, la cual permitiría el uso de monocapas de CdS en celdas fotovoltaicas.

Referencias

- [1] I. González, A. Trejo, M. Calvino, A. Miranda, F. Salazar, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson, Effects of surface and confinement on the optical vibrational modes and dielectric function of 3C porous silicon carbide: An ab-initio study, *Physica B: Condensed Matter* **550**, 420-427 (2018)
- [2] F. De Santiago, J. E. Santana, Á. Miranda, A. Trejo, R. Vázquez-Medina, L. A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Quasi-one-dimensional silicon nanostructures for gas molecule adsorption: a DFT investigation *Applied Surface Science* **475**, 278-284 (2019)

Agradecimientos

A. F. L. Agradece al programa BEIFI del Instituto Politécnico Nacional y al CONACyT por las becas de posgrado.

Usage of the CALPHAD method to estimate the thermodynamic stability of interfaces between lattice-matched $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ epitaxial layers grown by LPE on GaAs and InP substrates

Gorbachev A. Yu*, Galván Montalvo J. A., De Anda F., Michournyi V. A.

Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, C.P. 78210, San Luis Potosí, SLP, México

*Autor de correspondencia: andre@cactus.iico.uaslp.mx

Palabras clave: xx

In the Liquid Phase Epitaxy (LPE) technique the compositions of epitaxial layers are estimated by using the Liquid-Solid (L-S) Phase Diagrams. However, in the real processes the crystal growth begins very often from a liquid phase that is initially at non-equilibrium with the substrate. This may cause a notable melting of the solid surface and the formation of irregular interfaces between the different heterostructure layers with non-flat wavy boundaries and/or a composition gradient along the thickness. The thermodynamic stability η is estimated from the following relationship of the thicknesses of the melted d_{melt} and grown d_{gr} layers

$$\eta = \frac{d_{gr} - d_{melt}}{d_{gr}}$$

The estimations using the CALPHAD (Calculation of Phase Diagram) method and SGTE (Scientific Group Thermodata Europe) data were done for saturated liquid phases to form the interface with $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ solid phases of different compositions strictly lattice matched with GaAs and InP. It is shown that the interfaces are more stable in the case of the growth of an epitaxial layer whose As concentration is higher than that on the solid upon which it is growing. These estimations are consistent with experimental data that shows the establishments of very flat interfaces between the quaternary GaInAsP lattice matched solid on the InP substrate, on the contrary, interfaces with waving boundaries are formed on the GaAs substrates.

The usage of CALPHAD method can serve in LPE to develop device's heterostructures with higher perfection.

Efectos del confinamiento cuántico en las propiedades de detección de gases tóxicos de nanoalambres de Si

Francisco de Santiago*¹, Álvaro Miranda¹, Alejandro Trejo¹, Fernando Salazar¹, Eliel Carvajal¹, Miguel Cruz-Irisson¹ y Luis A. Pérez²

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, CP 04440, Ciudad de México, México

²Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, CP 01000, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: fdesantiagov0900@alumno.ipn.mx

Palabras clave: Nanoalambres, silicio, sensores, DFT

Los nanoalambres de silicio (SiNW) se han estudiado como sensores de gases nocivos, como CO, NO, NO₂ y SO₂ [1,2]. Para estas aplicaciones, los efectos de la superficie son de suma importancia. Sin embargo, los efectos de confinamiento cuántico también podrían influir en la capacidad de detección de los SiNW, y esta influencia, hasta donde sabemos, aún no se ha reportado en la literatura. En este trabajo se estudian los efectos de la adsorción de diferentes moléculas de gases tóxicos (CO, NO, NO₂ y SO₂) sobre la estructura electrónica de nanoalambres de silicio pasivados con hidrógeno (H-SiNW), orientados en la dirección cristalográfica [111], los cuales son calculados a través de la Teoría de las Funcionales de la Densidad. Para analizar los efectos del confinamiento cuántico, tres diámetros fueron considerados (Figura 1). Los resultados muestran que las energías de adsorción son casi independientes del diámetro de los alambres, siendo el NO₂ la molécula más fuertemente adsorbida (~3.44 eV). La estructura electrónica de H-SiNW de 1 nm de diámetro se modifica gracias a la creación de estados de impureza, electrónicamente aislados, tras la adsorción de la molécula. Sin embargo, estos niveles discretos son eventualmente hibridados con los estados originales del nanoalambre cuando el diámetro incrementa y el confinamiento cuántico es menos evidente. Así, existe un intervalo de diámetros pequeños para cada especie molecular con energías de adsorción y brechas prohibidas distintivas [3]. Los fenómenos cuánticos presentes en los nanoalambres de silicio los convierten en una gran plataforma para el estudio de la química fundamental detrás de la adsorción, y en el futuro podrían explotarse para aplicaciones innovadoras en detección de gases, catálisis y nanoelectrónica.

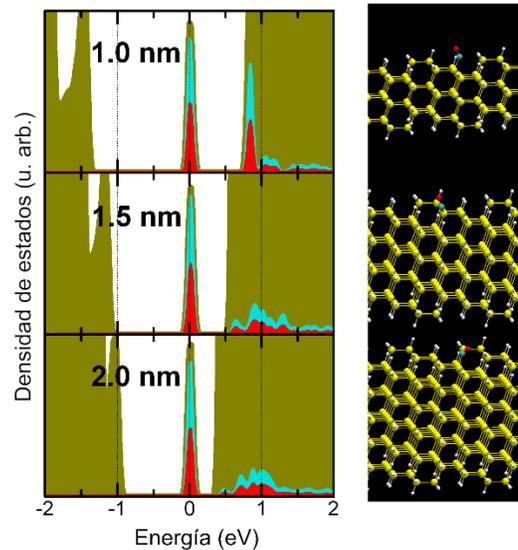


Figura 1. Estructuras de bandas electrónicas de los H-SiNW adsorbidos con CO.

Referencias

- [1] A. Miranda, F. de Santiago, L.A. Pérez and M. Cruz-Irisson, Silicon nanowires as potential gas sensors: A density functional study, *Sensors and Actuators B: Chemical* **242**, 1246-1250 (2017).
- [2] F. de Santiago, A. Trejo, A. Miranda, F. Salazar, E. Carvajal, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Carbon monoxide sensing properties of B-, Al- and Ga-doped Si nanowires, *Nanotechnology* **29**, 204001 (2018).
- [3] F. de Santiago, A. Miranda, A. Trejo, F. Salazar, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson, and L.A. Pérez, Quantum confinement effects on the harmful-gas-sensing properties of silicon nanowires, *International Journal of Quantum Chemistry* **118**, e25713 (2018).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por Proyectos Multidisciplinarios SIP-IPN 2016-1770 y 2018-1937; y UNAM-PAPIIT IN107717. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC UNAM. (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180), en supercomputadora Abacus-I de CINVESTAV-EDOMEX, y en la supercomputadora Xiuhcóatl de CINVESTAV (Proyecto LANCAD). F.S. agradece al CONACYT y BEIFI-IPN por sus becas.

Detección de monóxido de carbono por nanoalambres de Si dopados con B, Al o Ga

Francisco de Santiago^{1*}, Álvaro Miranda¹, Alejandro Trejo¹, Fernando Salazar¹, Eliel Carvajal¹, Luis A. Pérez², and Miguel Cruz Irisson¹

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacan, Av. Santa Ana 1000, CP 04440, Ciudad de México, México

²Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, CP 01000, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: fdesantiagov0900@alumno.ipn.mx

Palabras clave: Nanoalambres, silicio, sensores, monóxido de carbono

Los nanoalambres de silicio (SiNW) son considerados como potenciales sensores químicos gracias a su elevada relación superficie/volumen y su posible integración para aplicaciones nanotecnológicas. La detección de gases tóxicos con nanoalambres ha sido demostrada experimentalmente, sin embargo, la influencia del dopaje en la capacidad de detección de los SiNW no ha sido suficientemente reportada en la literatura [1,2]. En este trabajo se estudió la adsorción de una molécula de monóxido de carbono (CO) sobre un SiNW pasivado con hidrógeno, crecido a lo largo la dirección cristalográfica [111], y se comparó con la adsorción de otras moléculas como NO y O₂. Los nanoalambres se modelaron utilizando tres diámetros y tres dopantes (B, Al y Ga) (Figura 1). Los cálculos se realizaron en el marco de la Teoría de las Funcionales de la Densidad. Los resultados indican que la molécula de CO es adsorbida más fuertemente en los SiNW dopados en comparación con el SiNW sin dopar (UD). La energía de adsorción del CO en los SiNW sigue la tendencia: B > Al > Ga > UD, para todos los diámetros. El CO adsorbido en el SiNW sin dopar tiene un carácter aceptor, mientras que el adsorbido en los SiNW dopados tiene un carácter donador.

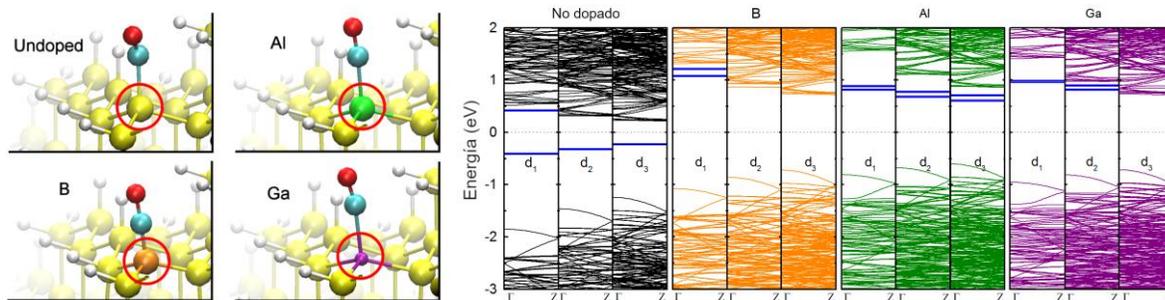


Figura 1. Configuración de mínima energía y estructura de bandas electrónicas, de los tres diámetros de nanoalambre estudiados, para la adsorción de CO en nanoalambres de silicio sin dopar, y dopados con Al, B o Ga [3].

La energía de adsorción del CO es mayor en comparación con la adsorción de NO y O₂, lo cual indica una posible buena selectividad hacia el CO, en un ambiente de varias moléculas [3]. Las barreras energéticas para la desorción son ligeramente elevadas, la mayor siendo de 2 eV, en el caso del boro. Nuestros resultados indican una clara aplicación de los SiNW en el desarrollo de mejores sensores de gases tóxicos y, lo que es más importante, un gran beneficio para la calidad de vida humana. La energía de adsorción del CO es mayor en comparación con la adsorción de NO y O₂, lo cual indica una posible buena selectividad hacia el CO, en un ambiente de varias moléculas [3]. Las barreras energéticas para la desorción son ligeramente elevadas, la mayor siendo de 2 eV, en el caso del boro. Nuestros resultados indican una clara aplicación de los SiNW en el desarrollo de mejores sensores de gases tóxicos y, lo que es más importante, un gran beneficio para la calidad de vida humana.

Referencias

- [1] F. de Santiago, A. Miranda, A. Trejo, F. Salazar, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson, and L.A. Pérez, Quantum confinement effects on the harmful-gas-sensing properties of silicon nanowires, *International Journal of Quantum Chemistry* **118**, e25713 (2018).
- [2] F. de Santiago, J.E. Santana, Á. Miranda, A. Trejo, R. Vázquez-Medina, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Quasi-one-dimensional silicon nanostructures for gas molecule adsorption: a DFT investigation, *Applied Surface Science* **475**, 278-284 (2019).
- [3] F. de Santiago, A. Trejo, A. Miranda, F. Salazar, E. Carvajal, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Carbon monoxide sensing properties of B-, Al- and Ga-doped Si nanowires, *Nanotechnology* **29**, 204001 (2018).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por Proyectos Multidisciplinarios SIP-IPN 2016-1770 y 2018-1937; y UNAM-PAPIIT IN107717. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC UNAM. (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180), en supercomputadora Abacus-I de CINVESTAV-EDOMEX, y en la supercomputadora Xiuhcóatl de CINVESTAV (Proyecto LANCAD). F.S. agradece al CONACYT y BEIFI-IPN por sus becas.

Efecto de la radiación laser intensa en las propiedades electrónicas de pozos cuánticos asimétricos dobles de GaAs/AlGaAs

J. Pérez-González^{1*}, A. Del Río-De Santiago², J. C. Martínez-Orozco¹

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina Paseo a La Bufa S/N. C.P. 98060, Zacatecas, Zac., México.

²Unidad Académica de Ingeniería, Universidad Autónoma de Zacatecas. México

*Autor de correspondencia: jimena.perez@fisica.uaz.edu.mx

Palabras clave: Láser Intenso, Pozos Cuánticos, AlGaAs.

Una finalidad de la física de heteroestructuras cuánticas es la búsqueda de factores que posibiliten la modificación óptima de las propiedades electrónicas del sistema en cuestión. En este trabajo se hace un análisis de los efectos provocados por la aplicación de campo magnético y radiación de láser intenso no-resonante en un modelo de pozos cuánticos semiconductores de GaAs/AlGaAs. Para el estudio del confinamiento de electrones en este tipo de heteroestructuras de estado sólido, donde se tiene la intervención de los efectos del campo de láser intenso, lo hacemos al trabajar en la aproximación de masa efectiva. El efecto de laser intenso, se hace a través del "laser-dressing parameter", con un rango de trabajo de 0 a 15 nm, que deforma el potencial "visto" por los electrones [1]. El campo magnético aplicado es homogéneo en la dirección x para un rango de 0 a 20 T [2]. Presentamos la dependencia de los niveles de energía bajo estas condiciones, encontrado que se posibilita un aumento en la diferencia energética de los mismos para lograr la transición principal de estados ante la aplicación de campo magnético. Mientras que el efecto del láser intenso manifiesta cambios significativos en el potencial de confinamiento conforme aumenta el valor del "laser-dressing parameter".

Referencias

[1] F. M. S. Lima, M. A. Amato, O. A. C. Nunes, A. L. A. Fonseca, B. G. Enders, and E. F. da Silva, Jr. J. Appl. Phys. **105**, 123111 (2009).

[2] J. C. Martínez-Orozco, J. G. Rojas-Briseño, K. A. Rodríguez-Magdaleno, I. Rodríguez-Vargas, M. E. Mora-Ramos, R. L. Restrepo, F. Ungan, E. Kasapoglu, C.A. Duque. Physica B. **525**, 30 (2017)

Efecto del litio en los modos ópticos de vibración y en las propiedades electrónicas en nanoestructuras de Ge

Akari Narayama Sosa*, Alejandro Trejo y Miguel Cruz-Irisson

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Anna 1000, C. P. 04440, Cd. de México, México.

*Autor de correspondencia: asosacamposeco@gmail.com

Palabras clave: Germanio poroso, DFT, Baterías de Iones de Litio.

En la actualidad, muchas investigaciones se centran en la búsqueda de materiales como electrodos para el desarrollo de dispositivos de almacenamiento de energía de alta capacidad, como las baterías de iones de Li. Con este fin, las nanoestructuras de germanio se han considerado como una alternativa atractiva para los ánodos debido a su alta capacidad de carga teórica, especialmente el germanio poroso (pGe). Existen numerosas investigaciones experimentales sobre la síntesis y caracterización del pGe, sin embargo, hay pocos estudios teóricos sobre estas nanoestructuras basadas en los modos ópticos de vibración y en sus propiedades electrónicas. En este trabajo se estudia el efecto del Li intersticial y superficial en las propiedades electrónicas del pGe y en las propiedades vibracionales en el germanio cristalino en bulto utilizando la teoría de los funcionales de la densidad (DFT) y la técnica de superceldas [1]. Los poros se modelaron eliminando columnas de átomos de Ge en la dirección [001] en una estructura cristalina en bulto. Los enlaces sueltos se pasivaron con átomos de H y luego se reemplazan gradualmente por átomos de Li. Los resultados muestran que el Li superficial disminuye la brecha de energía prohibida a medida que aumenta el número de átomos de Li, observándose una transición de carácter semiconductor a metálico para una concentración crítica. Por otro lado, los cálculos computacionales sobre las propiedades vibracionales muestran que las estructuras son estables ya que no hay frecuencias negativas en su densidad de estados de fonones. Para el caso con Li intersticial, los modos de más alta frecuencia corresponden a vibraciones del átomo de litio, las cuales podrían identificarse mediante espectroscopías como la infrarroja o Raman. Estos resultados podrían ser importantes para la aplicación de nanoestructuras de pGe en la tecnología de baterías iónicas.

Referencias

- [1] I. González, A. Trejo, M. Calvino, A. Miranda, F. Salazar, E. Carvajal and M. CruzIrisson, Effects of surface and confinement on the optical vibrational modes and dielectric function of 3C porous silicon carbide: An ab-initio study, *Physica B: Condensed Matter* **550**, 420-427 (2018).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por Proyectos Multidisciplinarios SIP-IPN 2016-1770 y 2018-1937 y 2019-0268. A.N.S. agradece al CONACYT y BEIFI-IPN por las becas otorgadas.

Almacenamiento de hidrógeno en germaneno decorado con metales alcalinos

Francisco de Santiago*, Akari Narayama Sosa, Álvaro Miranda

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Anna 1000, C. P. 04440, Cd. de México, México.

*Autor de correspondencia: fdesantiago@gmail.com

Palabras clave: Materiales 2D, DFT, Germaneno, Almacenamiento de hidrógeno.

En este trabajo se calcularon, a través de la Teoría de los Funcionales de la Densidad, la estructura electrónica, la estabilidad energética del germaneno prístino, y funcionalizado con átomos alcalinos (Figura 1), así como las propiedades de adsorción de moléculas de H_2 en el germaneno funcionalizado. Se analizó la adsorción de los átomos alcalinos en los sitios puente (B), hexagonal (H), arriba (T) y abajo (A) en una supercelda de germaneno de 4×4 [1]. Los resultados indican que el sitio más favorable es en el centro de los hexágonos (H) de la monocapa. Al comparar la energía de adsorción por molécula de H_2 en germaneno prístino y el decorado con metales, se encontró que la presencia de átomos alcalinos aumenta la adsorción de las moléculas de H_2 . Por otra parte, la energía de adsorción de las moléculas de H_2 sobre los átomos alcalinos está en el intervalo de fisisorción. Los cálculos numéricos indican que el germaneno decorado con potasio tiene la mayor capacidad de almacenamiento, el cual adsorbe hasta siete moléculas de H_2 (Figura 2). Por lo tanto el germaneno funcionalizado promete ser un candidato como material para el almacenamiento de hidrógeno [2].

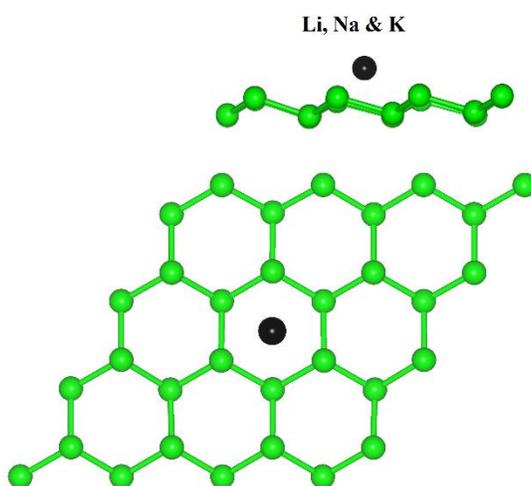


Figura 1. Vista lateral y superior de la geometría de la adsorción de los átomos metálicos en el sitio H del germaneno.

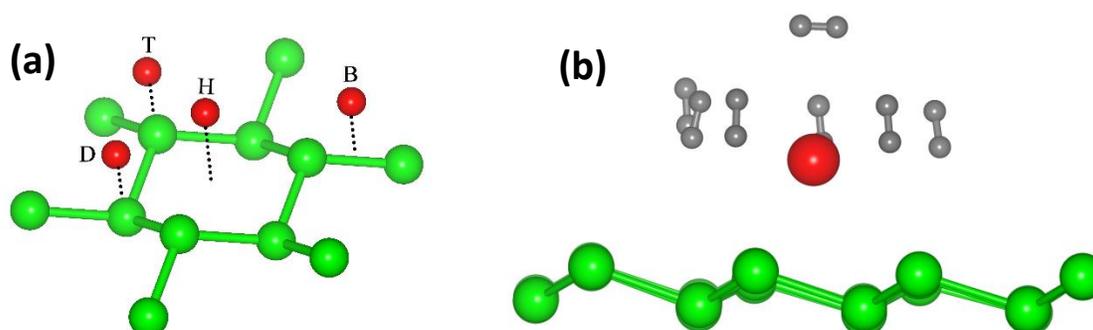


Figura 2. (a) Los sitios de adsorción en el germaneno, (b) Adsorción de siete moléculas de H_2 en el germaneno.

Referencias

- [1] F. de Santiago, J.E. Santana, A. Miranda, A. Trejo, R. Vázquez-Medina, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, *Applied Surface Science* **475**, 278-284 (2019).
- [2] F. de Santiago, A.N. Sosa, Á. Miranda, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, *International Journal of Hydrogen Energy*, **en revisión**, (2019).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por Proyectos Multidisciplinarios SIP-IPN 2016-1770 y 2018-1937; y UNAM-PAPIIT IN107717. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC UNAM. (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180), en supercomputadora Abacus-I de CINVESTAV-EDOMEX, y en la supercomputadora Xiuhcōatl de CINVESTAV (Proyecto LANCAD). A.N.S. y F.S. agradecen al CONACYT y BEIFI-IPN por sus becas.

Propiedades electrónicas del germanio poroso como ánodo en baterías de Li

Alan Macias-González, Akari Narayama Sosa*, Alejandro Trejo, Miguel Cruz-Irisson

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán Av. Santa Anna 1000, C. P. 04440 Cd. de México, México

*Autor de correspondencia: akari.sosa.gin.2016@gmail.com

Palabras Clave: Germanio Poroso, Baterías de Iones de Litio, DFT.

La ciencia y la tecnología de las baterías de litio han dominado el campo de las fuentes de energía avanzadas y han reemplazado a muchas otras baterías en el mercado, particularmente en las áreas de comunicaciones y electrónica. Durante los últimos años se ha desarrollado investigación teórica y experimental en física del estado para diseñar electrodos que aumenten la eficiencia de baterías de iones de Li. Algunas nanoestructuras de germanio se han considerado como una alternativa atractiva para los ánodos debido a su alta capacidad de carga teórica, especialmente el germanio poroso (pGe). En este trabajo se investigó el efecto del Li superficial sobre las propiedades electrónicas del pGe a través de la teoría de los funcionales de la densidad (DFT) y la técnica de superceldas [1]. Los poros se modelaron eliminando columnas de átomos de una supercelda de 72 átomos de Ge cristalino a lo largo de la dirección [001]. Los enlaces superficiales se pasivaron con H. Para modelar los efectos del Li superficial, algunos átomos de H fueron reemplazados por átomos de Li en la superficie del poro. Los resultados muestran que a medida que la concentración de Li aumenta en la superficie, la brecha de energía prohibida disminuye, favoreciendo la conducción electrónica en estas nanoestructuras, por lo cual las nanoestructuras basadas en pGe podrían aplicarse como electrodos en baterías de Li.

Referencias

- [1] I. González, A. N Sosa, A. Trejo, M. Calvino, A. Miranda and M. Cruz-Irisson, Lithium effect on the electronic properties of porous silicon for energy storage applications a DFT study, *Dalton Transactions* **47**, 7505-7514 (2018).

Agradecimientos

A.M.G y A.N.S agradecen al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACYT) por las becas otorgadas.

Método para la preparación de hierro nanométrico cero-valente, estable en aire, y uniformemente distribuido

Ruiz-Torres Claudio Adrián¹, Compeán-Jasso Martha Eugenia², Niño-Martínez Nereyda², Martínez-Castañón Gabriel Alejandro², y Ruiz Facundo^{2,*}

¹*Korea Advanced Institute of Science and Technology (KAIST) Daejeon, Corea del Sur.*

²*Universidad Autónoma de San Luis Potosí (UASLP), Facultad de Ciencias, Alvaro Obregón 64, San Luis Potosí, México*

*Autor de correspondencia: facundo@fciencias.uaslp.mx

Palabras clave:

En los últimos años, las nanopartículas de hierro cero-valente (ZVI, Zero Valent Iron) han sido ampliamente estudiadas principalmente por su potencial aplicación en temas de remediación ambiental como son descontaminación aguas subterráneas, purificación y tratamiento de aguas potables, y de eliminación de microalgas en ríos y presas. Estas nanopartículas cuentan con gran afinidad para una gran variedad de contaminantes y pueden ser usadas en fase sólida o acuosa lo que los ubica como una herramienta muy atractiva para temas de remediación ambiental. Una gran variedad de métodos para la síntesis de nanopartículas de ZVI han sido reportados, todos ellos lidian con el inconveniente de la alta reactividad de estas nanopartículas que invariablemente tienden a oxidarse. La gran mayoría de estos métodos son complejos, requieren de muchos pasos, y es necesario llevar a cabo la síntesis en condiciones inertes y en presencia de gases de argón o nitrógeno. Además, una vez sintetizadas la nanopartículas, el otro gran problema es mantener la integridad de las nanopartículas en condiciones ambientales. En este trabajo se presenta un método sencillo y optimizado para producir nanopartículas de hierro cero-valente funcionalizadas con etilenglicol (EG), el método puede ser usado bajo condiciones no inertes [1]. Se identificó la coordinación de las iones de hierro, durante las síntesis de este material, y el mecanismo de funcionalización de las nanopartículas mediante Espectroscopia de Absorción UV-Vis y Absorción infrarroja (FTIR). Como era de esperarse las nanopartículas funcionalizadas muestran mayor dispersibilidad debido de la repulsión estérica inducida por las moléculas de etilenglicol, que se encuentran adheridas a las nanopartículas. Estas moléculas son las responsables de aminorar y evitar la oxidación de las superficie de las nanopartículas. En nanopartículas no funcionalizadas con etilenglicol la formación de óxido es bastante notoria en comparación a las si funcionalizadas. Estos resultados pueden ser correlacionados con la capacidad de reducción de contaminantes en ambos casos [2]. Por lo tanto el uso de etilenglicol permite fabricar nanopartículas de hierro cero valentes en condiciones no inertes y para su uso en remediación ambiental.

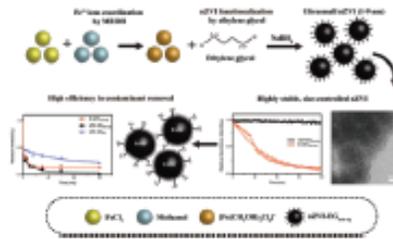


Fig. 1 Nanopartículas de ZVI

Referencias

- [1] Ruiz-Torres CA, Araujo-Martínez RF, Martínez-Castañón GA, et al, Chem Eng J. 336, 112 (2018).
 [2] Claudio Adrian Ruiz-Torres, René Fernando Araujo-Martínez, et al, Environmental Engineering Research, 24(3) 463 (2019)

Agradecimientos

Este trabajo recibió apoyo por parte del proyecto Programa de Fortalecimiento de la Investigación para el Desarrollo de la Educación y la Sociedad (PROFIDES) Convocatoria 2017, Nanomateriales Multifuncionales Para la Sustentabilidad y el Bienestar de la Sociedad.

Estudio de Excitones Indirectos y Triones en pozos cuánticos asimétricos acoplados

O. Ruiz Cigarrillo^{1*}, L.F. Lastras Martínez¹, E.A. Cerda Mendez¹, G. Flores Rangel¹, R.E. Balderas Navarro¹, L.E. Guevara Macías¹, J. Ortega Gallegos¹, A. Lastras Martínez¹, K. Biermann² y P. V. Santos².

¹Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Álvaro Obregón 64, San Luis Potosí, SLP 78000, México.

²Paul-Drude-Institut für Festkörperelektronik, Hausvogteiplatz 5-7, 10117 Berlin, Germany

*Autor de correspondencia: oscar Ruiz@cactus.iico.uaslp.mx

Palabras clave: Triones, Excitones Indirectos, pozos cuánticos, fotorreflectancia.

Los excitones indirectos son un par electrón-hueco distribuido espacialmente entre dos pozos cuánticos acoplados, sus propiedades los hacen ser un buen sistema para el estudio de bosones fríos además de ser excelentes candidatos para la creación de dispositivos basados en excitones [1,2]. En este trabajo se reporta la respuesta de Triones formados en una estructura de pozos cuánticos asimétricos acoplados medidos mediante la técnica de espectroscopia modulada conocida como fotorreflectancia, además se presenta la respuesta de las transiciones de excitones indirectos las cuales se asocian a la estructura asimétrica de los pozos acoplados.

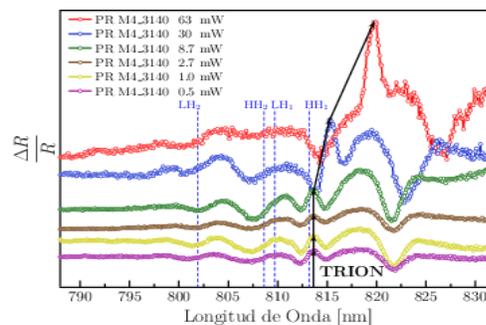


Fig. 1 Espectros de fotorreflectancia a diferentes potencias de laser de una estructura de pozos cuánticos asimétricos acoplados.

Referencias

- [1] C. Hubert, K. Biermann, A. Hernández-Mínguez y P.V. Santos, *Superlattices and Microstructures*, **108**, 51-56 (2017)
- [2] Butov, L. V, *Superlattices and Microstructures*, **108**, 2-26 (2017)

Agradecimientos

Se agradece a: Consejo Nacional de Ciencia y tecnología por el apoyo brindado, a los técnicos Jorge González Fortuna, Francisco Ramírez Jacob y Esequiel Ontiveros Hernández por el apoyo para con este trabajo.

Actividad catalítica del grafeno dopado con boro para reacciones de reducción de oxígeno

Lucia G. Arellano^{1*} y Jun Nakamura²

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, C.P. 04440, Ciudad de México, México

²Department of Engineering Science, The University of Electro-Communications (UEC-Tokyo), Chofu, Tokyo 182-8585, Japan

* Autor de correspondencia: lucia.arellano.gin2017@gmail.com

Palabras clave: Grafeno, Catálisis, Reacciones oxido reducción, Materiales bidimensionales

Las celdas de combustible han atraído recientemente mucha atención como sistemas de energía ecológicos. En una celda de combustible la energía se obtiene a través de una reacción electroquímica de hidrógeno con oxígeno. El principal problema que impide la implementación generalizada de las celdas de combustible es que la reacción de reducción de oxígeno (ORR) en el cátodo es menos eficiente que la reacción de oxidación de hidrógeno en el ánodo. Actualmente, los materiales basados en platino se utilizan comúnmente como catalizadores efectivos para la ORR. Sin embargo estos materiales tienen muchos problemas, incluyendo un alto costo y una baja durabilidad. Por lo tanto, se requiere un catalizador alternativo al platino con una alta actividad de ORR. Investigamos la actividad catalítica de grafeno dopado con boro (B-G) hacia las ORR utilizando cálculos a primeros principios dentro de la teoría de los funcionales de la densidad. Los resultados muestran que los potenciales máximos de electrodo para la ruta de cuatro electrones ($4e^-$) son más bajos que los de la ruta de dos electrones ($2e^-$) en casi todos los sitios de reacción, eso nos confirma que el grafeno dopado con boro es un material que no es un buen catalizador. Además se observó que el electrón está localizado en el átomo del boro y las reacciones intermedias pueden adsorberse sobre el átomo de boro.

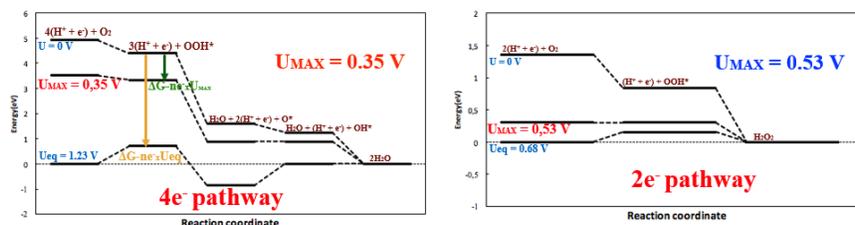


Figura 1 Resultados de las rutas de $4e^-$ y $2e^-$.

Referencias

[1] Matsuyama, Haruyuki, Akira Akaishi, y Jun Nakamura, ACS Omega **4.2** 3832-3838 (2019).

Agradecimientos

L.G.A. agradece a BEIFI-IPN y COFAA-IPN por su apoyo financiero.

Monocapa de carburo de silicio decorada con metales para almacenamiento de H₂

Lucia G. Arellano*, Francisco de Santiago, Álvaro Miranda

Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, C.P. 04440, Ciudad de México, México

* Autor de correspondencia: lucia.arellano.gin2017@gmail.com

Palabras clave: Almacenamiento de hidrógeno, Carburo de silicio, Monocapas

Dada su gran relación superficie-volumen, las monocapas bidimensionales son ideales para el almacenamiento de hidrógeno en celdas de combustible. Se ha demostrado que la monocapa de carburo de silicio (MSiC) tiene una hibridación sp^2 que lo convierte en una alternativa al grafeno. En este trabajo, las propiedades de adsorción de hidrógeno de una monocapa de carburo de silicio decorada con átomos de metales alcalinos y alcalinotérreos se analizan mediante cálculos a primeros principios. Los resultados muestran que los metales causan poca distorsión en la monocapa y tienden a ser adsorbidos en sitios por encima de los átomos de Si. Los átomos metálicos actúan como sitios de adsorción para las moléculas H₂: hasta siete moléculas pueden ser adsorbidas por K, Mg y Ca. [1,2].

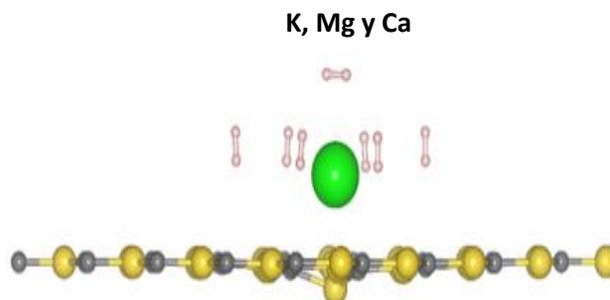


Fig. 1 Adsorción de 7H₂, de MSiC decorada con K, Mg y Ca.

Referencias

- [1] Baierle, Rogerio J., Caroline J. Rupp, and Jonas Anversa, *Applied Surface Science* **435**, 338-345 (2018).
- [2] Song, Nahong, et al, *Computational Materials Science* **99**, 150-155 (2015).

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por los proyectos multidisciplinarios IPN-SIP 2018-1937. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Mitzli de DGTICUNAM (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180), L.G.A. y F.S. agradecen a BEIFI-IPN y al CONACyT por las becas.

Estudio a primeros principios de la perovskita $\text{CsSnI}_{3-x}\text{Br}_x$ para aplicación fotovoltaica

I. Ornelas-Cruz¹, R. Oviedo-Roa², A. Trejo-Baños¹, F. Salazar¹

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, 04430 Ciudad de México, México

²Instituto Mexicano del Petróleo, Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, 07730 Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: ivan.ornelas.gin2014@gmail.com

Palabras clave: Perovskitas, fotovoltaica, DFT.

Las perovskitas de haluro de estaño y cesio, CsSnX_3 , con $X = \text{Cl}, \text{Br}$ o I ; han atraído mucha atención debido a que sus propiedades opto-electrónicas las hacen idóneas para implementarse en celdas fotovoltaicas (CFs) [1]. Una de las maneras de aumentar el rendimiento de una CF a base de este compuesto ha sido por medio de la inserción de más de un halógeno en el sitio X: $\text{CsSnX}_{3-x}\text{Y}_x$ con $X, Y = \text{Cl}, \text{Br}$ o I ; siendo X el halógeno con un radio iónico más grande que Y [1]. De esta manera se ha logrado una eficiencia del 10.34%, para una CF con CsSnI_2Br [2]. Bajo este contexto, se ha realizado un estudio a primeros principios con base en la Teoría de las Funcionales de la Densidad, utilizando la Aproximación del Gradiente Generalizado y la técnica de superceldas [3], sobre las propiedades estructurales y electrónicas del compuesto $\text{CsPbI}_{3-x}\text{Br}_x$ con $x = 0.0, 0.5, 1.0, 1.5, 2.0, 2.5$ y 3.0 ; considerando la fase ortorrómbica del compuesto CsSnI_3 y la fase cúbica del compuesto CsSnBr_3 como la estructura inicial y final, respectivamente. Debido a la inequivalencia de los sitios X (Figura 1a), dos estructuras se consideraron para $0.5 \leq x \leq 2.5$. Los resultados demuestran que la estructura del compuesto $\text{CsSnI}_{3-x}\text{Br}_x$ es muy sensible a la concentración de Br, causando que la variación de los parámetros de red no cumple con la ley de Vegard (Figura 1b). Además, la tendencia de la brecha prohibida de energía en función de la concentración de Br se reprodujo, mismo que puede emplearse como parámetro para determinar la distribución de los halógenos dentro de la estructura (Figura 2a). Finalmente, el compuesto $\text{CsSnI}_{3-x}\text{Br}_x$ demostró ser estable únicamente para las concentraciones $x = 0.5, 1.0$ y 2.0 (Figura 2b); dichas configuraciones tuvieron los enlaces Sn-Br más estables, lo que explica la reducción de defectos Sn^{4+} y la mejora de rendimiento como material fotovoltaico en comparación con el CsSnI_3 .

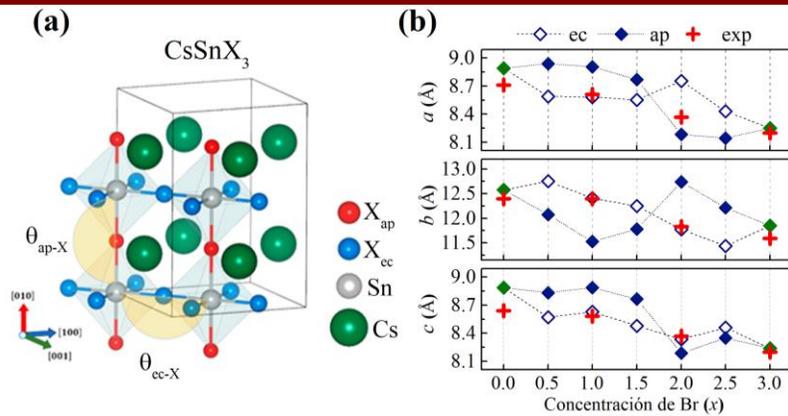


Fig. 1 (a) Celda ortorrómbica tipo perovskita del compuesto CsSnX₃ con X = halógeno, los sitios apical y ecuatorial se identifican como X_{ap} y X_{ec}, respectivamente. (b) Parámetros de red como función de la concentración de Br.

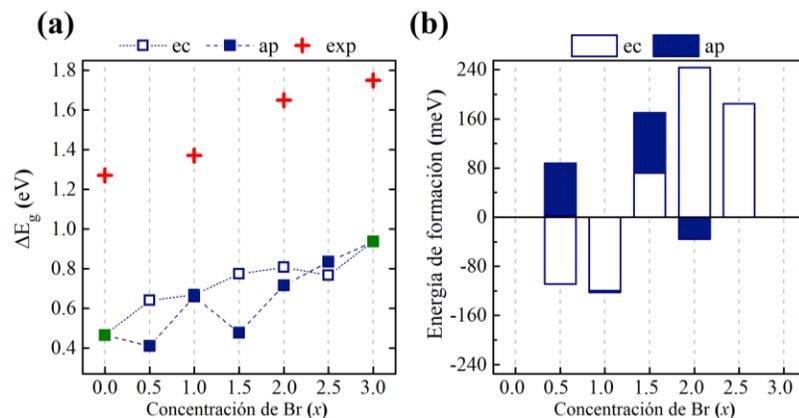


Fig. 2 (a) Valor de la brecha prohibida de energía, E_g, como función de la concentración de Br. (b) Energías de formación para 0.5 ≤ x ≤ 2.5.

Referencias

- [1] J. Liang, J. Liu y Z. Jin, *Solar RRL* **1**, 1700086 (2017).
- [2] J. S. Niezgoda, B. J. Foley, A. Z. Chen y J. J. Choi, *ACS Energy Letters* **2** (2017).
- [3] I. González, A. Trejo, M. Calvino, F. Salazar, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson, *Physica B: Condensed Matter* **550** (2018).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por los proyectos multidisciplinarios IPN-SIP 20181293 y 20181937. Además I. Ornelas-Cruz agradece el apoyo económico por parte del CONACyT y la SENER.

Efecto del litio en las propiedades electrónicas del silicio poroso aplicado a baterías

Israel González, Akari N. Sosa, Alejandro Trejo*, Marbella Calvino, Álvaro Miranda, Miguel Cruz-Irisson

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, San Francisco Culhuacán, Coyoacán, Ciudad de México, México.

*Autor de correspondencia: atrejoba@ipn.mx

Palabras clave: Silicio poroso, difusión de Li.

Durante los últimos años, se ha dedicado un gran esfuerzo al desarrollo de nuevos materiales anódicos que mejoren la capacidad de almacenamiento de las baterías de iones de litio. En este sentido, el silicio cristalino ha despertado gran interés ya que su capacidad gravimétrica de 4200 mAh/g (más de 10 veces superior a la del grafito) podría dar lugar a ánodos de mayor capacidad. Sin embargo, estudios experimentales han confirmado que durante la litiación el silicio presenta una gran expansión volumétrica, la cual conduce a la pulverización del material y disminuye su capacidad de almacenamiento. Para superar esta gran limitación, nuevos estudios han sugerido el empleo de el silicio poroso (pSi), ya que su intrínseca morfología permitiría reducir los esfuerzos internos y disminuir el severo cambio de volumen. Las enormes expectativas en torno a esta nanoestructura de la materia condensada, han promovido el desarrollo de numerosas investigaciones experimentales, sin embargo, los estudios teóricos enfocados en la descripción del mecanismo de interacción entre el Li y el pSi son aún escasos.

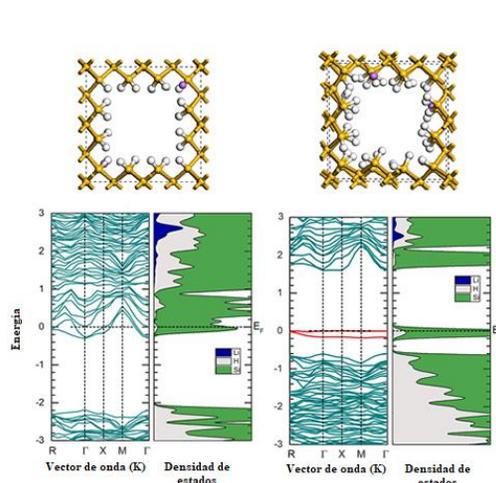


Figura 1. Estructura de Bandas del pSi intersticial (panel izq.) y pSi sustitucional (panel der.) [1].

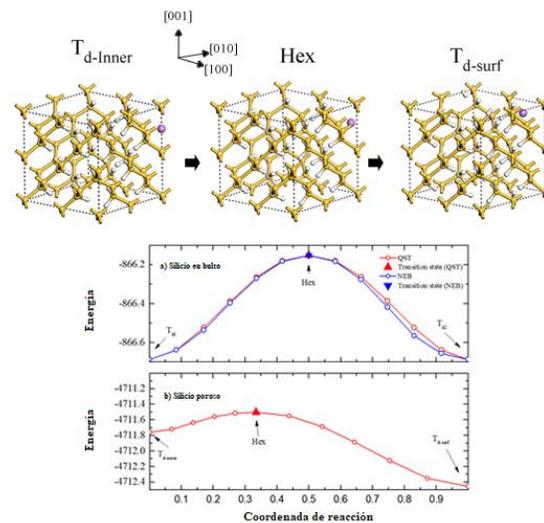


Figura 2. Trayectoria de difusión del Li [1].

Motivados por la importancia tecnológica de este tema y por la evidencia experimental a cerca de la síntesis exitosa del pSi, en este trabajo estudiamos las propiedades electrónicas del pSi con Li intersticial y sustitucional, a partir de un estudio a primeros principios fundamentado en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), la aproximación generalizada del gradiente (GGA) y la técnica de superceldas [1,2]. Las estructuras porosas se modelaron eliminando columnas de átomos en la dirección [100] y los enlaces sueltos generados fueron pasivados con hidrógeno. En un primer estudio se ha reemplazando algunos átomos de hidrogeno con litio y en otro caso se ha insertando litio en posiciones intersticiales equivalentes. Los resultados muestran que el litio intersticial siempre induce el comportamiento metálico en el pSi, mientras que en el caso sustitucional, la magnitud de la brecha de energía prohibida depende de la concentración y ubicación de litio, así como del grado de amorfización del pSi. Por otra parte, los cálculos de búsqueda de los estados de transición muestran que las rutas de difusión probables en el pSi se encuentran entre sitios Td con un estado de transición en un sitio Hex. Sin embargo, la barrera de difusión desde el sitio de Td de la superficie al sitio de Td interno sugiere que la ubicación del Li intersticial tendría una posición más favorable cerca de la superficie de los poros. Estos resultados podrían ser interesantes para el desarrollo de baterías de iones de Li con ánodos basados en pSi.

Referencias

- [1] I. González, A.N. Sosa, A. Trejo, M. Calvino, A. Miranda y M. Cruz-Irisson, Lithium effect on the electronic properties of porous silicon for energy storage applications: a DFT study, Dalton Transactions **47**, 7505-7514 (2018).
- [2] F. De Santiago, J. E. Santana, Á. Miranda, A. Trejo, R. Vázquez-Medina, L. A. Pérez, M. Cruz-Irisson, Quasi-one-dimensional silicon nanostructures for gas molecule adsorption: a DFT investigation, Applied Surface Science **475**, 278-284 (2019).

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por los proyectos multidisciplinarios SIP-IPN, 2016-1770, 2016-1771, 2017-0885, 2017-1212 y 2018-1239.

Almacenamiento de H₂ en silicio poroso funcionalizado con Li, Pd y Be

Israel González*, Francisco de Santiago, Lucía G. Arellano, Álvaro Miranda, Alejandro Trejo, Miguel Cruz-Irisson

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, San Francisco Culhuacán, Ciudad de México, México.

*Autor de correspondencia: israel.ipn.esime@gmail.com

Palabras clave: Silicio poroso, Almacenamiento de H₂.

Debido a la falta de sistemas eficientes de almacenamiento de H₂, actualmente ha surgido un gran interés por el desarrollo de sistemas de almacenamiento en materiales de estado sólido. Particularmente, el silicio poroso (pSi) ha sido considerado como posible candidato para este fin, ya que su gran área superficial químicamente activa podría aprovecharse para almacenar grandes cantidades de H₂. Debido a la reciente evidencia experimental sobre la síntesis exitosa de pSi así como la falta de investigación teórica sobre el almacenamiento de hidrógeno en pSi funcionalizado; en este trabajo se desarrolla un estudio *ab initio* acerca de los efectos de la funcionalización con Li, Be y Pd sobre las propiedades de adsorción de H₂ en pSi. El modelado computacional se ha desarrollado empleando la Teoría del Funcional de Densidad, dentro de la aproximación de gradiente generalizado y utilizando pseudopotenciales conservadores de la norma [1]. Las estructuras porosas se modelaron de acuerdo con la técnica de superceldas [2] mediante la eliminación de columnas de átomos en la dirección [0 0 1] sobre un cristal perfecto de Si en bulto.

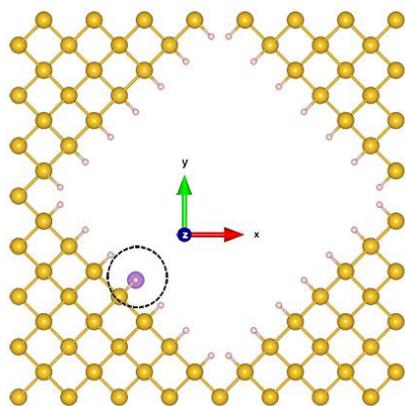


Figura 1. Sitio de adsorción:
Li, Pd y Be en pSi

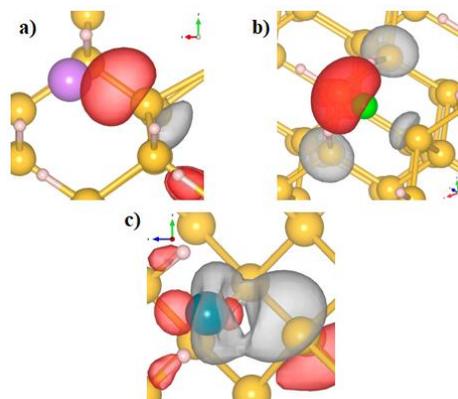


Figura 2. Orbital HOMO del pSi funcionalizado con a) Li, b) Be y c) Pd

Los enlaces rotos han sido pasivados con H y posteriormente se han sustituido diferentes átomos metálicos sobre la superficie del poro mientras se agrega H_2 en sus proximidades. Los resultados muestran que los átomos metálicos no se agrupan (a diferencia de lo que sucede en el grafeno), mientras que la adsorción de moléculas H_2 se ve mejorada con la presencia de los átomos metálicos. La máxima adsorción corresponde al Li, debido a que logra transferir mayor carga electrónica al pSi; y aunque las energías de adsorción con los otros elementos metálicos (Pd, Be) se encuentran dentro del intervalo de fisorción, las nanoestructuras porosas funcionalizadas con Li adsorben hasta 5 moléculas de H_2 , mientras que las estructuras con Pd y Be solo pueden adsorber 4 y 0 moléculas, respectivamente. Los resultados de esta investigación podrían ser de gran importancia en la comprensión de la interacción de H_2 y metales alcalinos, alcalinotérreos y de transición, además de que podrían promover el uso del pSi como sistema de almacenamiento de hidrógeno.

Referencias

- [1] I. González, A.N. Sosa, A. Trejo, M. Calvino, A. Miranda y M. Cruz-Irisson, Lithium effect on the electronic properties of porous silicon for energy storage applications: a DFT study, Dalton Transactions **47**, 7505-7514 (2018).
- [2] F. De Santiago, A. Miranda, A. Trejo; F. Salazar, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson, L.A. Pérez, Quantum confinement effects on the harmful-gas-sensing properties of silicon nanowires, International Journal of Quantum Chemistry **118**, e25713 (2018).

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por los proyectos multidisciplinarios SIP-IPN, 2016-1770, 2016-1771, 2017-0885, 2017-1212 y 2018-1239.

Efectos de la anisotropía en las propiedades electrónicas de nanoalambres de diamante con defectos vacancia-nitrógeno

Jonathan Galvan Gamboa, Jesús Ramírez Solano y Alejandro Trejo Baños*

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, 04430 Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: atrejoba@ipn.mx

Palabras clave: Nanoalambres, Diamante, Vacancias, Nitrógeno

En el desarrollo de la computación y la comunicación cuántica, las mejoras en los sólidos capaces de emitir un solo fotón son de gran importancia. Los avances en la emisión de fotones individuales se han logrado experimentalmente mediante el uso de defectos vacancia-nitrógeno (N-V) en nanoalambres de diamante. Sin embargo, estudios teóricos sobre los efectos anisotrópicos en las propiedades electrónicas de estos materiales es casi inexistente. En esta investigación a primeros principios, se analizaron las propiedades electrónicas y la densidad de estados de los nanoalambres de diamante con defectos N-V. Basándose en la teoría de la densidad funcional y la técnica de superceldas [1-3], se han modelado los nanoalambres en dos direcciones de crecimiento [001] y [111], como se muestra en la Figura 1. Los enlaces sueltos generados en la superficie se pasivaron con átomos de hidrógeno (H). Los resultados muestran que los defectos N-V introducen múltiples estados planos o de trampa dentro de la brecha prohibida de energía, como se ve en la figura 2. La diferencia de energía entre estos estados está influenciada por la dirección de crecimiento de los nanoalambres, lo que podría contribuir a la emisión de fotones con diferentes longitudes de onda. La presencia de estos estados planos podría reducir la tasa de recombinación entre la conducción y la banda de valencia, favoreciendo así la emisión de un solo fotón.

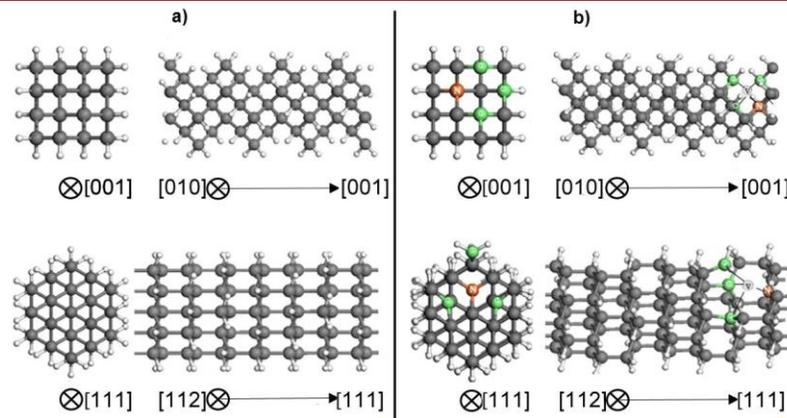


Figura.1 Modelo de alambres orientados en la dirección [001] (panel superior) y [111] (panel inferior) a) sin defectos y b) con defectos N-V. Tomado de [1]

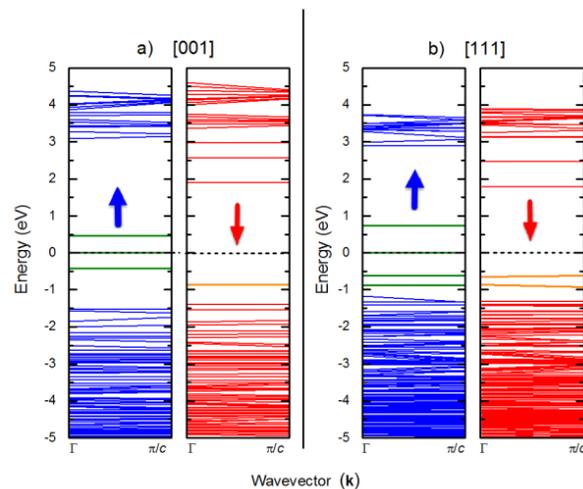


Figura. 2 Estructura de Bandas con espín de CNWs con defectos N-V orientados en las direcciones a) [001] y b) [111], la dirección de las flechas indican espín arriba (azul) y espín abajo (rojo). Tomado de [1].

Referencias

- [1] J. R. Solano, A. T. Baños, Á. M. Durán, E. C. Quiroz y M. Cruz-Irisson, "DFT study of anisotropy effects on the electronic properties of diamond nanowires with nitrogen-vacancy center" *Journal of molecular modeling*, **23**(10), 292. (2017).
- [2] A Trejo, A Miranda, L Toscano-Medina, R Vázquez-Medina, M Cruz-Irisson, "Optical vibrational modes of Ge nanowires: a computational approach", *Microelectron Eng* **159**:215–220. (2016).
- [3] A Trejo, M Ojeda, JL Cuevas, A Miranda, LA Pérez y M Cruz-Irisson, "Electronic structure and optical vibrational modes of 3C– SiC nanowires" *Int J Nanotechnol* **12**(3-4):275–284. (2015).

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por proyectos multidisciplinarios: IPN2016-1770 e IPN2016-1771 del Instituto Politécnico Nacional.

Análisis dinámico y propiedades electrónicas de la perovskita $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{CaBr}_3$

H. Espinosa*, I. Ornelas, A. Trejo, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson.

Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica-Culhuacán, Instituto Politécnico Nacional

*Autor de correspondencia: horacio_f1@hotmail.com

Palabras clave: Fonón, perovskita

Los perovskitas híbridas orgánicas-inorgánicas surgen como un nuevo material para la siguiente generación de energía fotovoltaica, actualmente la mayor eficiencia corresponde a la perovskita de haluro de plomo con 22.7%. Sin embargo, en las celdas solares de perovskita de haluro de plomo actuales, la toxicidad es una limitación para su comercialización, por ende, el desarrollo de nuevas perovskitas haluro sin plomo es de gran interés. Entre los cationes divalentes adecuados para el sitio B en la estructura de perovskita, el calcio (Ca^{2+}) surgió como un ion atractivo para sustituir el plomo, debido a la similitud de los radios iónicos con el Plomo. En este trabajo, se estudia la estabilidad de la perovskita híbrida $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{CaX}_3$ ($X = \text{Cl}^-, \text{Br}^-, \text{I}^-$), y mediante el cálculo de las propiedades vibracionales, variando principalmente la rotación de moléculas en la cavidad cubooctaédrica. Todos los cálculos se realizaron utilizando la Teoría de Perturbaciones del Funcional de la Densidad, en el marco de la aproximación del gradiente generalizado con pseudopotenciales conservadores de la norma [1]. Se probaron múltiples orientaciones de la molécula orgánica para lograr todos los estados de fonones positivos, indicando una estructura estable, luego se analizaron los modos vibracionales, densidad de estados (DOS), IR y Raman para determinar qué vibración de enlace contribuye a qué modo en el espectro fonón. Además, la estructura de bandas electrónicas y la densidad de estados (DOS) se calculan para observar en primera instancia, la viabilidad del material para su uso en celdas solares. Los resultados de las propiedades electrónicas muestran una brecha prohibida amplia alrededor de 3eV, sin embargo, sus propiedades podrían hacer que esta perovskita sea atractiva en el desarrollo de celdas solares tándem. Los cálculos indican que hay una orientación específica de la molécula orgánica que estabiliza la estructura, no se observa una clara diferenciación de los intervalos de los modos de fonón, excepto los modos de estiramiento H que tienen frecuencias alrededor de 3000 cm^{-1} que muestran una fuerte actividad Raman.

Referencias

- [1] A. Trejo, A. Miranda, L.K. Toscano-Medina, R. Vázquez-Medina and M. Cruz-Irisson, Optical vibrational modes of Ge nanowires: A computational approach. *Microelectronic Engineering*, **159**,215-220 (2016).

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por proyectos multidisciplinarios SIP-IPN 2019- 1941,2019-1969 and 2019-1937

Estudio teórico de las propiedades mecánicas y electrónicas de nanoalambres de Si con Li intersticial

F. Salazar^{1*}, A. Miranda¹, A. Trejo¹, L. A. Pérez² y M. Cruz-Irisson¹

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, Ciudad de México, México

²Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Dirección 2, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: fsalazarp@ipn.mx

Palabras clave: Nanoalambres de silicio, baterías de litio, propiedades electrónicas, módulo de Young

En este trabajo, se presenta un estudio del módulo de Young y de las propiedades electrónicas de nanoalambres de silicio pasivados con hidrógeno y crecidos en la dirección cristalográfica [111] con diferentes concentraciones de átomos de litio (Li) intersticial en diferentes posiciones T_d . El estudio se realiza usando la teoría del funcional de la densidad en la aproximación de densidad local. Los resultados indican que la presencia de Li cierra la conocida brecha semiconductor de los nanoalambres pasivados con hidrógeno y Li superficial [1], mostrando un comportamiento metálico, incluso con la inserción de un solo átomo de Li [2]. La participación de los átomos de Li en la densidad de estados electrónica es casi constante en las bandas de valencia y de conducción. El análisis de la energía de formación revela que el nanoalambre pierde estabilidad como función de la concentración de Li, mientras que la energía de enlace por átomo de Li sugiere la formación de enlaces Si-Li. Por otro lado, el módulo de Young del nanoalambre aumenta a bajas concentraciones de Li y presenta una ligera disminución para altas concentraciones de Li. Estos resultados indican que el nanoalambre de Si soporta los esfuerzos internos al insertar Li y podría ofrecer una vida útil más larga en electrodos de baterías recargables. Los resultados de esta investigación ayudan a entender como cambian las propiedades mecánicas y electrónicas de los nanoalambres de Si pasivados con hidrógeno en los procesos de carga-descarga y abren la posibilidad de incorporarlos como electrodos en baterías recargables.

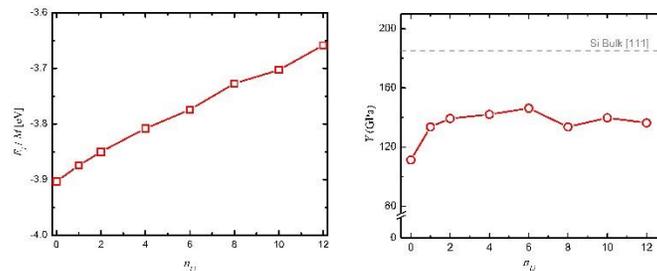


Fig. 1 Energía de formación (izquierda) y módulo de Young (derecha) del nanoalambre de Si pasivado con hidrógeno como función de la concentración de átomos de Li por celda unitaria.

Referencias

- [1] F. Salazar, L. A. Pérez y M. Cruz-Irisson, Effects of surface passivation by lithium on the mechanical and electronic properties of silicon nanowires, *Solid State Communications* **247**, 6-11 (2016).
- [2] A. González-Macías, F. Salazar, A. Miranda, A. Trejo, I.J. Hernández-Hernández, L.A. Pérez, y M. Cruz-Irisson, Theoretical study of the mechanical and electronic properties of [111]-Si nanowires with interstitial lithium, *J Mater Sci: Mater Electron* **29**, 15795-15800 (2018).

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por los proyectos multidisciplinarios 2016-1770, 2016-1771, 2018-1969, 2018-1937 de SIP-IPN, y UNAM-PAPIIT IN107717. Los cálculos fueron realizados en los clústers de supercómputo Miztli (proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180), Xiuhcóatl de LANCAD-Cinvestav, y Abacus-I de Cinvestav-EDOMEX.

Efectos de la litación en las propiedades estructurales y electrónicas de nanoalambres de Si como material anódico

Francisco de Santiago¹, José E. González¹, Álvaro Miranda¹, Alejandro Trejo¹, Fernando Salazar^{1*}, Luis A. Pérez² y Miguel Cruz-Irisson¹

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, 04440, Ciudad de México, México.

²Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, 01000, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: fdesantiagov0900@alumno.ipn.mx

Palabras clave: Nanoalambres, silicio, baterías de iones de litio, propiedades electrónicas, módulo de Young

La necesidad de diseñar materiales que aumenten el almacenamiento de energía ha motivado el desarrollo de nuevos electrodos para baterías de iones de litio (Li). Los nanoalambres de silicio han sido considerados como electrodos alternativos, sin embargo, los efectos del Li en su brecha de energía prohibida y en sus propiedades mecánicas ha sido escasamente estudiado. En este trabajo se presenta un estudio, en el marco de la Teoría de los Funcionales de la Densidad, de las propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres de silicio pasivados con hidrógeno (H-SiNWs) crecidos en la dirección cristalográfica [001]. Los átomos de Li son insertados gradualmente en posiciones intersticiales o reemplazando átomos de hidrógeno (H) superficiales. Los resultados muestran que, para los H-SiNWs con Li superficial, la brecha de energía prohibida disminuye como función de la concentración de Li, mientras que los nanoalambres con Li intersticial se vuelven conductores, incluso con la adición de un solo átomo de Li. La energía de formación disminuye con la concentración de Li para el caso superficial, mientras que el comportamiento opuesto se observa para el caso de Li intersticial. Adicionalmente, para el caso de Li superficial, la energía de enlace de los átomos de Li revela la existencia de enlaces Si-Li, mientras que para el caso intersticial la energía de enlace se incrementa como función del número de átomos de Li hasta una concentración crítica, donde algunos enlaces Si-Si se rompen. Finalmente, para el caso de Li superficial, el módulo de Young (Y) se incrementa con la concentración de Li, mientras que, para el caso intersticial, Y sufre una repentina disminución a una cierta concentración de Li, provocada por los grandes esfuerzos mecánicos dentro de la estructura del nanoalambre. Estos resultados permiten considerar a los H-SiNWs como posibles candidatos para electrodos en baterías de iones de Li.

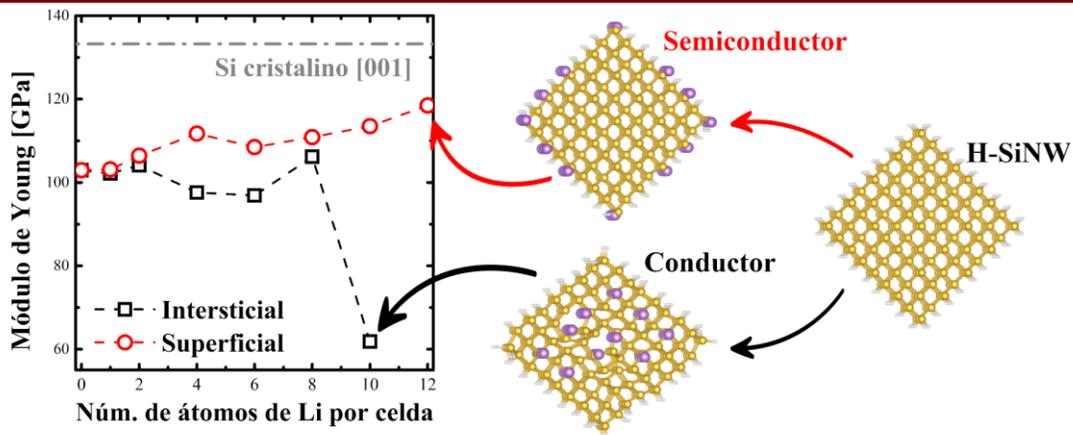


Figura 1. (Izq.) Módulo de Young contra número de átomos de Li por celda unitaria, para los casos de litación superficial (cuadrados negros) e intersticial (círculos rojos). (Der.) Secciones transversales de los nanoalambres de Si antes y después de la litación a la concentración más alta estudiada.

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por los proyectos multidisciplinarios 2016-1770, 2016-1771, 2018-1969, 2018-1937 de SIP-IPN, y UNAM-PAPIIT IN107717. Los cálculos fueron realizados en los clústers de supercómputo Miztli (proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180), Xiuhcóatl de LANCAD-Cinvestav, y Abacus-I de Cinvestav-EDOMEX. J.E.G. agradece la beca posdoctoral otorgada por CONACYT-SENER

Estudio de las propiedades electrónicas y vibracionales del pSi como material anódico para baterías de Li-ion

Ismael Machorro*, Israel González, Alejandro Trejo y Miguel Cruz-Irisson

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, San Francisco Culhuacán, Ciudad de México, México.

*Autor de correspondencia: ismael.machoro@gmail.com

Palabras clave: Silicio poroso, Fonones, baterías de Li-ion.

El almacenamiento de energía a gran escala se ha convertido en una parte fundamental en el desarrollo de los vehículos eléctricos, razón por lo cual se ha promovido una intensa investigación relacionada con el perfeccionamiento de las baterías de Li-ion. Particularmente, la generación de nuevos materiales anódicos ha sido uno de los principales temas de investigación, ya que el aumento en la capacidad gravimétrica de estos materiales, podría mejorar la capacidad de almacenamiento de este tipo de baterías. A este respecto, las principales propuestas apuntan hacia el Silicio Poroso (pSi), ya que su elevada capacidad gravimétrica (~ 1400 mAh/gr), su potencial disponibilidad como materia prima y sus técnicas de síntesis cada vez más precisas; podrían posicionarlo como un atractivo material anódico. Motivados por las excelentes perspectivas a cerca del pSi, en este trabajo estudiamos las propiedades electrónicas y vibracionales del Si como material en bulto, pSi prístino y pSi interactuando con Li en una posición intersticial y en una sustitucional. En este estudio a primeros principios basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT), se ha empleado la técnica de superceldas [1], la aproximación del gradiente generalizado y pseudopotenciales conservadores de la norma. Las estructuras porosas modeladas constan de 64 átomos de Si, a la cual se le han eliminado columnas de átomos en la dirección [100] y cuyos enlaces sueltos han sido pasivados con hidrógeno. Los resultados muestran que en el caso del litio intersticial se induce el comportamiento metálico en el pSi, mientras que en el caso sustitucional, la magnitud de la brecha de energía prohibida tiende a disminuir. Por otra parte, los cálculos de propiedades vibracionales muestran que el silicio prístino tiende a ser inestable, toda vez que la dispersión fonónica muestra frecuencias negativas. Por su parte, las estructuras porosas con Li intersticial y sustitucional han mostrado estabilidad energética ya que su correspondiente dispersión fonónica presenta tres intervalos de dispersión bien definidos que incluyen las siguientes frecuencias: 0-500, 550-900 y 1900-2100 cm^{-1} . Finalmente, se ha calculado el calor específico de cada uno de los sistemas porosos estables, de lo cual se concluye que el pSi con Li intersticial posee un calor específico ligeramente inferior al pSi con Li sustitucional, sin embargo en ambos casos, esta propiedad es inferior comparada con el calor específico del silicio cristalino; lo cual podría ser benéfico, ya que el Li no logra modificar drásticamente las propiedades termodinámicas del pSi. Los resultados obtenidos en esta investigación, podrían ser relevantes para la comprensión de

los efectos del Li sobre las propiedades del pSi, además de que podrían promover el uso del pSi como material anódico en baterías de Li-ion.

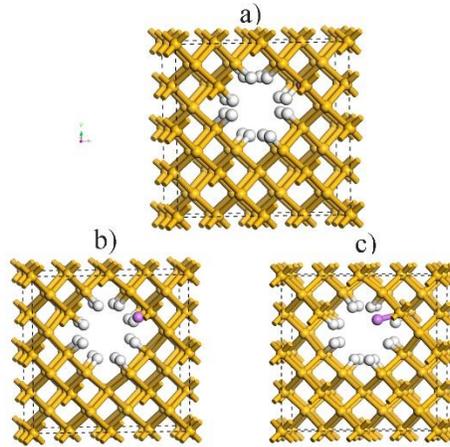


Figura 1. Silicio poroso a) pasivado con H, b) con Li intersticial, c) con Li sustitucional.

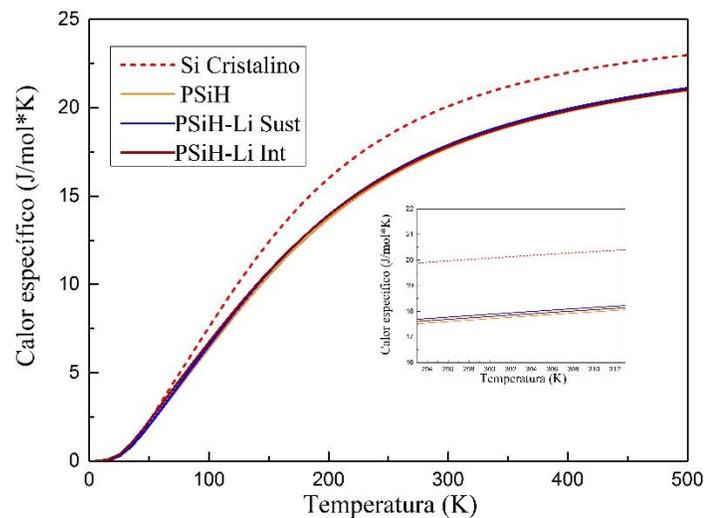


Figura 2. Calor específico del silicio cristalino, pasivado con H, con Li intersticial y Li sustitucional.

Referencias

- [1] I. González, A.N. Sosa, A. Trejo, M. Calvino, A. Miranda y M. Cruz-Irisson, Lithium effect on the electronic properties of porous silicon for energy storage applications: a DFT study, Dalton Transactions **47**, 7505-7514 (2018).

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por los proyectos multidisciplinarios SIP-IPN, 2016-1770, 2016-1771, 2017-0885, 2017-1212 y 2018-1239.

Estudio teórico de las propiedades electrónicas y mecánicas del carburo de silicio poroso halogenado.

K. Madrigal, A. Ángeles, M. Calvino, y Alejandro Trejo*

Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, San Francisco Culhuacán, Ciudad de México, México.

*Autor de correspondencia: alejandtb13@gmail.com

Palabras clave: Silicio poroso, Fonones, baterías de Li-ion.

El carburo de silicio poroso (pSiC) ha sido identificado como un material atractivo para aplicaciones en situaciones adversas de temperatura y frecuencia. Una de las implementaciones más atractivas de este material se encuentra en los supercapacitores, donde el carburo de silicio poroso se ha identificado como un buen material anódico. A pesar de que existen múltiples investigaciones experimentales sobre el pSiC, existen muy pocas investigaciones teóricas, en especial sobre el efecto de la pasivación superficial sobre las propiedades electrónicas y mecánicas del pSiC. En este trabajo, utilizando la teoría de los funcionales de la densidad y el método de superceldas [1], se estudia el efecto de la pasivación con Halógenos sobre las propiedades electrónicas y mecánicas del carburo de silicio poroso. Las estructuras porosas se modelan al remover columnas de átomos en la dirección [100] de un cristal perfecto de SiC. La morfología de los poros se eligió de tal manera que la superficie sea compuesta exclusivamente por átomos de Si (rico en Si) o Carbono (rico en C). Los enlaces sueltos de la superficie se pasivaron con átomos de H, y algunos de estos se intercambian con átomos de F o Cl. Los resultados indican que existe una dependencia de las constantes elásticas respecto al elemento de la superficie y al halógeno pasivante mostrando que generalmente el poro rico con Si posee un módulo de Young más elevado en comparación con el poro rico en C en todas las pasivaciones exceptuando la pasivación H+Cl. En ambos casos (rico en silicio y rico en carbono), la brecha prohibida de energía disminuye para las pasivaciones con H+F y H+Cl respecto al totalmente hidrogenado.

Referencias

- [1] I. González, A.N. Sosa, A. Trejo, M. Calvino, A. Miranda y M. Cruz-Irisson, Lithium effect on the electronic properties of porous silicon for energy storage applications: a DFT study, Dalton Transactions **47**, 7505-7514 (2018).

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por los proyectos multidisciplinarios SIP-IPN, 2016-1770, 2016-1771, 2017-0885, 2017-1212 y 2018-1239.

Estudio de las propiedades ópticas y térmicas de nanocristales semiconductores de InP coloidales.

Juan José Ortiz-Estrada¹, J. Martín Yañez-Limón², M. Lucero Gómez-Herrera¹, Daladier A. Granada-Ramírez³, Julio G. Mendoza-Alvarez⁴

¹ Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro, Cerro de las Campanas S/N, Santiago de Querétaro 76010

² Unidad Querétaro, Cinvestav-IPN, Libramiento Norponiente #2000, Frac. Real de Juriquilla, Santiago de Querétaro 7623

³ Doctorado en Nanociencias y Nanotecnología, Cinvestav-IPN, Av. IPN 2508, Ciudad de México 07360

⁴ Departamento de Física, Cinvestav-IPN, Av. IPN 2508, Ciudad de México 07360

*Autor de correspondencia: lucero.gomez@uaq.mx

Palabras clave: Silicio poroso, Fonones, baterías de Li-ion.

Se reportan los avances del proyecto en el que se realiza la medición de la difusividad térmica de nanocristales semiconductores, también conocidos como puntos cuánticos, PC's, de InP. Se tiene la expectativa que a baja dimensionalidad los PCs de InP posean propiedades ópticas y eléctricas distintas con beneficios en sus aplicaciones como marcadores fluorescentes en biomedicina. El interés del uso de PCs es debido a estas nuevas propiedades como el cambio en la estructura de bandas de energía. Cuando ocurren efectos de confinamiento cuántico en tres dimensiones, como es el caso de los PCs, la densidad de estados pasa a ser descrita por funciones delta de Dirac, con lo cual se cuantizan los niveles de energía en las bandas de conducción y valencia, dando como resultado un aumento en la energía de la banda prohibida al disminuir el tamaño de los PCs. Por ello, la información obtenida de medición por espectroscopia de fotoluminiscencia y fotoacústica de estos NCs semiconductores es de gran relevancia para conocer parámetros tales como: coeficientes de absorción óptica, de conductividad y difusividad térmica que nos ayuden a decidir la viabilidad en la aplicación de PCs de uso biomédico.

De lo obtenido de la emisión de fotoluminiscencia se tiene una energía de banda prohibida (2.1-2.9 eV) para los QDs, mostrando que la brecha de banda aumenta a medida que el tamaño de las nanopartículas disminuye, tal y como se predice en la teoría. Y de la caracterización térmica por TWRC (Thermal-Wave Resonator Cavity) se muestra que la difusividad térmica aumenta a medida que la nanopartícula reduce su tamaño. A medida que disminuye el tamaño de partícula, aumenta la relación efectiva de área de superficie a volumen, y el movimiento browniano de las nanopartículas mejora los mecanismos de transferencia de calor por convección. Se discute la variación en las propiedades ópticas y térmicas, en función del tamaño de los PCs.

Índice de Autores

A

A. A. Krokhin, 54
A. Ángeles, 115
A. Del Río-De Santiago, 60, 89
A. Díaz de Anda, 53
A. Esparza García, 59
A. Lastras Martínez, 43, 97
A. M. Reyes, 58
A. Mamian, 19
A. Miranda, 45, 74, 76, 78, 80, 85,
87, 92, 99, 102, 104, 109, 111
A. Puga-Candelas, 72
A. Reyes Usuga, 34
A. Valdespino, 29
A.M. Bolarín Miró, 30
A.M. Fernández, 23
Adriana García Gallardo, 26
Akari Narayama Sosa, 90, 92, 94,
102
Alan Macias-González, 94
Alejandro Kunold Bello, 17
Alejandro Trejo, 45, 47, 52, 74,
83, 85, 87, 90, 94, 100, 102,
104, 106, 108, 109, 111, 113,
115
Alessio Palavicini, 41
Alma L. Marcos-Viquez, 65
Amanda Carrillo Castillo, 26
Andrés de Luna Bugallo, 57
Angel Daniel de la Merced, 78
Antony F. López, 83

B

B. Aguilar, 29, 39
B. E. Maldonado-Villa, 82

C

Chumin Wang, 11, 41, 50

D

D. Cardona Ramírez, 35
D. Fernández, 45
D. Medina-Escobedo, 43
D. P. Fernández, 68
D.Y. Torres Martínez, 29
Daladier A. Granada Ramírez, 22
Daladier A. Granada-Ramírez,
116
De Anda F, 84
Diosdado Villegas, 37
Dr. José Miguel García-Martín, 1

E

E. Alva, 70
E. Carvajal, 45, 63, 68, 70, 85, 87,
108
E. Huipe-Domratcheva, 36
E. López Moreno, 66
E. López-Moreno, 42
E. Zúñiga, 68, 70
E.A. Cerda Mendez, 97
E.J. Guzmán, 49, 61
Emmanuel Haro-Poniatowski, 18
Emmanuel Paredes-Rocha, 28
Enrique Francisco Pinzón
Escobar, 59

F

F. Leyvraz, 32
F. Pérez-Rodríguez, 8
F. Salazar, 45, 68, 78, 85, 87, 109,
111
F. Sánchez-De Jesús, 30
F. Ungan, 40
Fabiola Vázquez Hernández, 22
Fernando Salazar, 83
Francisco de Santiago, 74, 78, 80,
85, 87, 92, 99, 104, 111

G

G. Alvarez, 30, 42
G. Álvarez, 66
G. Bolaños, 19
G. Flores Rangel, 97
G. Flores-Rangel, 43
G. Viramontes Gamboa, 34, 35
Galván Montalvo J. A., 84
Gerardo A. Galicia, 76
Gerardo Contreras Puente, 13
Gerardo G. Naumis, 21
Gorbachev A. Yu, 84
Gregorio H. Cocoltzi, 15

H

H Noverola-Gamas, 73
H. Espinosa, 108
H. Montiel, 30, 42, 66
H. Rebollo Sandoval, 35
Héctor Muñoz, 76
Herlinda Montiel, 59

I

I. F. Bedoya, 58
I. González, 52, 102, 104
I. Ornelas, 108
I. Rodríguez-Vargas, 49, 61
Ismael Machorro, 113
Israel González, 113

J

J. A. Montoya, 58
J. A. Pérez Ruiz, 34
J. Arriaga, 54
J. C. Martínez-Orozco, 40, 60, 62,
72, 82, 89
J. De La Torre, 39
J. E. González, 50, 111
J. G. Rojas-Briseño, 62
J. G. Torres Morales, 56

J. Galvan Gamboa, 106
J. Guzmán Mendoza, 56
J. Heiras, 19

J. J. Realpe, 19
J. M. Cervates, 70
J. Martín Yañez-Limón, 116
J. Ortega Gallegos, 97
J. Ortega-Gallegos, 43
J. Pérez-González, 89
J. Ramírez Solano, 106
J. Saúl Arias Cerón, 22
J.E. Antonio, 47
J.F. Barrón-López, 30
Jazael Gómez Ocampo, 10
Jessica Lillo Ramiro, 26
Jesús Alberto León-Flores, 63
Jesús Arriaga, 37
Joam M. Rincón Zuluoaga, 26
José Eduardo Barrios Vargas, 12
José Eduardo Santana, 74
José Luis Rosas, 63
José S. Arellano Fierro, 26
Juan José Ortiz-Estrada, 116
Juan Pedro Luna Arias, 22
Julio G. Mendoza-Alvarez, 22,
116
Jun Nakamura, 2, 98

K

K. A. Rodríguez-Magdaleno, 40,
60, 82
K. Biermann, 97
K. Madrigal, 115

L

L. A. Ibarra Bracamontes, 34
L. A. Pérez, 45
L. M. Hernández Ramírez, 35
L.E. Guevara Macías, 97
L.F. Lastras Martinez, 43, 97
Laura A. Carrasco Chavez, 26
LM Gaggero Sager, 73
Lorenzo A. López, 80
Lucía G. Arellano, 98, 99, 104

Luis A. Pérez, 20, 45, 65, 74, 85,
87, 109, 111

M

M. A. Ibarias, 54
M. A. Solís, 7
M. C. Peña Gomar, 35
M. Calvino, 52, 102, 115
M. Cruz-Irison, 45, 47, 52, 65,
74, 83, 85, 87, 90, 94, 102,
104, 108, 109, 111
M. del P. Morales-Morelos, 43
M. E. Mora-Ramos, 62
M. Losurdo, 43
M. Lucero Gómez-Herrera, 116
Manuel A. Chairez Ortega, 26
Marco Antonio Díaz Villarreal, 12
María de la Luz Mota González,
26
María del Rocio Nava Lara, 10
María Lucero Gómez Herrera, 22
Martha Eugenia Compeán-Jasso,
95
Martín Romero, 63
Martínez-Castañón Gabriel
Alejandro, 95
Mayra A. Hernández Granados,
26
Michournyi V. A., 84
Miguel A. Hernández Vázquez, 57

N

N. M. Makarov, 8
Nikodem Szpak, 5
Niño-Martínez Nereyda, 95

O

O Oubram, 73
O. Navarro, 29, 36, 39, 49, 58, 61
O. Oubram, 49, 61
O. Ruiz Cigarrillo, 43, 97
Olaf Jaime Riverón, 24

P

P. V. Santos, 97
Patricia Rodríguez Frago, 22
Patricia Salas, 7

R

R. Castro-García, 43
R. Daniel Olguín Melo, 57
R. González-Reyes, 72
R. I. López Esquivel, 56
R. Oviedo-Roa, 70
R. Vázquez-Medina, 74
R.E. Balderas Navarro, 43, 97
Raúl Escamilla, 63
Ricardo Bermeo, 83
Roberto Escudero-Derat, 16
Ruiz Facundo, 95
Ruiz-Torres Claudio Adrián, 95

S

S. G. Castillo-López, 8

T

T. Rivera Montalvo, 56
T. Soto, 39
Thomas Stegmann, 5, 28, 32

V

Vicenta Sánchez, 14, 50

W

W.J. Rodríguez Cruz, 53

Y

Y. Barrera, 39
Y. Betancur-Ocampo, 32

Z

Zorayda Lazcano, 37