

Reunión Anual 2021 División de Estado Sólido

Sociedad Mexicana de Física

Libro de Resúmenes
3 al 5 de mayo de 2021 (en línea)



BUAP



Comité organizador

Dr. Jesús Arriaga Rodríguez
Instituto de Física - BUAP.
arriaga@ifuap.buap.mx

Dra. Zorayda Lazcano Ortiz
Instituto de Física - BUAP.
zlazcano@ifuap.buap.mx

Dr. José Eduardo Barrios Vargas
Facultad de Química - UNAM.
j.e.barrios@gmail.com



BUAP



Programa de la Reunión Anual de la División de Estado Sólido 2021, SMF

LUNES 3 de mayo de 2021				
9:00 AM	Bienvenida			
	CLAVE	TÍTULO	AUTORES	ADSCRIPCIÓN
9:20 a.m.	Conferencia invitada	Metamateriales piezoelectromagnéticos	Dr. Felipe Pérez Rodríguez	Instituto de Física, BUAP
10:00 a. m.	9SB	Estudio de la disociación de O ₂ sobre monocapas de SnC decoradas con Au	Alma L. Marcos-Viquez, Álvaro Miranda, Margarita C. Crisóstomo, Marbella Calvino, Miguel Cruz-Irisson y Luis A. Pérez	Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán
10:20 AM	2SB	Rendimiento termoeléctrico mejorado en bicapa de grafeno por las resonancias Fano e híbridas	J. A. Briones-Torres, R. Pérez-Álvarez, S. Molina-Valdovinos, I. Rodríguez-Vargas	Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, UAZ
10:40 AM	3SB	Almacenamiento de hidrógeno en SiGe pristino y BSiGe decorados con metales	Brandon Jhoseph Cid, Akari Nayarama Sosa, Álvaro Miranda, Luis A. Pérez, Fernando Salazar, Miguel Cruz-Irisson	Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán
11:00 AM	4SB	Irradiación de bicapas de grafeno	Navarro-Espino, M. y Barrios-Vargas, J.E.	Facultad de Química, UNAM
11:20-11:40 AM	RECESO			
11:40 AM	1NE	Adsorción de urea en nanoalambres de silicio decorados para un potencial diagnóstico de uremia	José Eduardo Santana, Francisco de Santiago, María Isabel Iturrios, Álvaro Miranda, Luis Antonio Pérez, Miguel Cruz-Irisson	Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán
12:00 PM	2NE	OBTENCIÓN DE GRAFENO MULTICAPA A PARTIR DE SUBPRODUCTOS DE NANOTUBOS DE CARBONO	F. G. Granados, B. O. Aguilar y O. Navarro	Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM
12:20 PM	3NE	Efectos del litio en las propiedades electrónicas del Ge poroso como material anódico para baterías	Akari Narayama Sosa, Israel González, Alejandro Trejo, Álvaro Miranda, Fernando Salazar y Miguel Cruz Irisson	Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán
12:40 p. m.	12NE	Estudio teórico de las propiedades electrónicas de nanoalambres de Ge con Li	Tania Leal, I. Iturrios, F. Salazar, A. Miranda y M. CruzIrisson	Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán
1:00 PM	5NE	Nanoestructuras metálicas obtenidas por síntesis verde	L. F. López-Vázquez, M. Cortez-Valadez	Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora
1:20-4:00 PM	RECESO			
4:00 PM	1PM	Semimetales Topológicos de Nudo Nodal	Velázquez-López E. C., J. E. Barrios-Vargas	Facultad de Química, UNAM
4:20 PM	2PM	Near and far optical properties of a cluster of six silver nanospheres using DDA method	Arturo Santos-Gomez y Ana Lilia González	Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
4:40 PM	3PM	Cristales fotónicos dieléctrico-grafeno con celda unitaria de Potencial químico no periódico	A. Sánchez-Arellano, D. Ariza-Flores, J. S. Pérez-Huerta, S. Amador-Alvarado, I. A. Sustaíta Torres, J. Madrigal-Melchor	Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, UAZ
5:00 PM	4PM	Sintonización de la viscosidad efectiva en metamateriales acústicos	J. Doporto, J. Arriaga y M. Ibarias	Instituto de Física, BUAP
5:20-5:40 PM	RECESO			
5:40 PM	5SB	Análisis de dos cadenas de Fibonacci acopladas	E. Huipe-Domratheva, O. Navarro	Unidad Morelia, Instituto de Investigación en Materiales, UNAM
6:00 PM	6SB	Diseño y simulación de un biosensor para la detección de estrés oxidativo basado en MoS ₂ bidimensional	Martínez-Angeles W. L., González-Reynoso O., Carbajal-Arizaga G. G. y García-Ramírez M. A.	Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, UdG
6:20 PM	7SB	Uniones pnp de fosforeno como guías de ondas perfectas	Yonatan Betancur Ocampo, Emmanuel Paredes Rocha y Thomas Stegmann	Instituto de Ciencias Físicas, UNAM
6:40 PM	8SB	Reduction of the Twisted Bilayer Graphene Chiral Hamiltonian into a 2x2 matrix operator and physical origin of at-bands at magic angles	Gerardo G. Naumis, Leonardo A. Navarro-Labastida, Enrique Aguilar-Mendez	Instituto de Física, UNAM
07:00 p. m.	1SB	Modelado del almacenamiento de hidrógeno en monocapa de GeC decorada con Cu, Ag y Au	Lucía G. Arellano, Francisco De Santiago, Álvaro Miranda, Luis A. Pérez, Jun Nakamura, Miguel Cruz-Irisson	Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán

Programa de la Reunión Anual de la
División de Estado Sólido 2021, SMF

MARTES 4 de mayo de 2021				
HORA	CLAVE	TÍTULO	AUTORES	ADSCRIPCIÓN
9:00 AM		RECONOCIMIENTO AL Dr. Rubén Gerardo Barrera Pérez		
9:40 AM	6NE	Análisis numérico de una nano-estructura semiconductor para aplicaciones bio-médicas, la cual co-integra NEMS con tecnología MOS	García-Ramírez, M. A., González-Reynoso, O, Martínez-Angeles, W. L., Vargas-Rodríguez, E., Guzmán-Chávez, A.D. y Bello-Jiménez, M. A	Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Depto. de Electrónica, UdG
10:00 AM	7NE	Ultrathin heterojunctions of armchair graphene nanoribbons as resonant-tunnelling devices	Francisco Sánchez-Ochoa, G. Canto, Gregorio H. Cicoletzi y Michael Springborg	Instituto de Física, UNAM
10:20 AM	8NE	Biosíntesis de nanobarras de hematita a partir de la planta de savila "Aloe ciliaris".	J. León-Flores, M. Martínez Mondragon, Roberto Henandez Reyes, J. Barreto Rentería, S. Tehuacanero, J. A. Arenas Alatorre	Instituto de Física, UNAM
10:40 AM	9NE	Adsorción de nucleobases de ADN/ARN en nanoalambres de silicio	Kevin J. Garcia, Jose E. Santana, María I. Iturrios, Margarita C. Crisóstomo, Alejandro Trejo, and Álvaro Miranda	Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán
11:00 AM	10NE	Propiedades electrónicas de nanoalambres [001] de Ge con Li superficial	J.A.M. Banda, M. Crisóstomo, F. Salazar, L. A. Pérez y M.C. Irsson	Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán
11:20-11:40 AM	RECESO			
11:40 a. m.	10SB	Localización de excitones por patrones de moiré en heteroestructuras de dicalcogenuros de metales de transición	Isaac Soltero, Francisco Mireles y David A. Ruíz-Tijerina	Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM
12:00 p. m.	11SB	Estudio de propiedades estructurales y eléctricas del Telurio (3D) y Telureno (2D)	Gerardo Alejandro Montano González, Raúl Mauricio Torres Rojas, David Armando Contreras Solorio, Agustín Enciso Muñoz	Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas
12:20 p. m.	12SB	Óptica electrónica de gradiente de índice en uniones pn de grafeno	Emmanuel Paredes Rocha, Yonatan Betancur Ocampo, Nikodem Szpak y Thomas Stregmann	Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México
12:40 p. m.	13SB	Transporte electrónico en pocas capas de fosforeno	Armando Q. Arciniega-Gutiérrez, Thomas Stegmann	Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México
01:00 p. m.	14SB	Transporte cuántico y termoeléctricidad en estructuras complejas de grafeno	R. Rodríguez-González, L. M. Gaggero-Sager y I. Rodríguez Vargas	Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, UAZ
1:20-4:00 PM	RECESO			
04:00 p. m.	2SA	Difusión de humedad en sólidos con geometrías planas y esféricas: Casos de coeficientes de difusión constante y dependiente de la concentración	David Rodríguez Fernández, Jesús E. Hernández Ruiz y Williams Morales González	Departamento de Física, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Cuba
04:20 p. m.	13NE	Implementación de algoritmos de aprendizaje automático para la predicción de la resonancia del plasmón superficial en nanocubos de oro	Jesús Andrés Arzola Flores y Ana Lilia González Ronquillo	Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
04:40 p. m.	16SB	Reflectometría a 450 de hojuelas de MoS2 sobre sustrato	Samantha Pérez-Díaz, Enrique Quiroga-González y Felipe Pérez-Rodríguez	Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
05:00 p. m.	1SA	Characterization of the water transport in concretes mixed with pozzolanic residues of bamboo (bamboo leaf ash): kinetic parameters	Ernesto Villar-Cociña, Jesús Hernández-Ruiz and Raikol Ortega	Departamento de Física, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Cuba
5:20-5:40 PM	RECESO			
05:40 p. m.	2SC	Modificación de las propiedades físicas de Teluro de Cadmio aplicando rampas de potencia durante el depósito por medio de erosión catódica	E. Rincón, E. Rosendo, H. Pérez Ladrón de Guevara, R. Romano, C. Morales, G. García, A. Coyopol and R. Galeazzi	Posgrado en Dispositivos Semiconductores, BUAP
06:00 p. m.	3SC	Efecto del tratamiento térmico sobre las propiedades estructurales y eléctricas de películas de AZO depositadas por erosión catódica	A. Carranza, E. Rosendo, H. Pérez Ladrón de Guevara, C. Morales, R. Romano, G. García, A. Coyopol and R. Galeazzi	Posgrado en Dispositivos Semiconductores, BUAP
06:20 p. m.	1PP	Surface structures of magnetostrictive D03-Fe3Ga(001)	Ricardo Ruvalcaba, Joseph P. Corbett, Andrada-Oana Mandru, Noboru Takeuchi, Arthur R. Smith, Jonathan Guerrero-Sanchez	Centro de Nanociencias y Nanotecnología, UNAM
06:40 p. m.	2PP	Efecto de la longitud de la cadena lateral y las propiedades ópticas de los líquidos iónicos N-etil-N, N, Ntrialquilamonio: un estudio ab-initio	M. A. Olea-Amezcuca, J. E. Castellanos-Aguila, H. Hernández-Cicoletzi, E. Ferreira, M. Trejo-Durán, O. Olivares-Xometl, Natalya V. Likhanova	Universidad de Guanajuato, División de Ingenierías, Campus Irapuato-Salamanca
07:00 p. m.	1SC	Desarrollo de Dispositivos Semiconductores para Electrónica Flexible	Miguel A. Dominguez, Sonia Ceron, Ovier Obregon, Salvador Alcantara, Susana Soto and Jose L. Sosa	Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores, Instituto de Ciencias, BUAP

MIÉRCOLES 5 de mayo de 2021

	CLAVE	TÍTULO	AUTORES	ADSCRIPCIÓN
09:00 a. m.	Conferencia invitada	Disociación de excitones en dispositivos fotovoltaicos orgánicos	Dr. Fernando Sánchez	Facultad de Química, UNAM
09:40 a. m.	5PM	Estudio de capas antirreflejantes de metaestructuras para celdas solares	H. Hernández-Florez, C. J. Diliegros-Godines y F. PérezRodríguez	Instituto de Física, BUAP
10:00 a. m.	6PM	Estudio óptico y estructural de las películas delgadas de ZnO/Al ₂ O ₃ depositadas por ALD	Frank Romo, Jorge A. Montes, Godofredo García y Rafael García Gutiérrez	Universidad de Sonora, Departamento de Investigación en Física
10:20 a. m.	7PM	Mejoramiento de la transferencia de calor radiativa de campo cercano mediante películas delgadas superconductoras	S. G. Castillo-López, C. Villarreal, R. Esquivel-Sirvent y G. Pirruccio	Instituto de Física, UNAM
10:40 a. m.	8PM	Tracking the sputtering deposition of oxygen-free Nb and Si thin films and formation of Nb/Si heterostructure	J.G. Medrano, F. J. Flores-Ruiz, V. Garcia-Vazquez, F. PérezRodríguez	Instituto de Física, BUAP
11:00 a. m.	9PM	Efecto de nanopartículas metálicas en la emisión de tierras raras	A. Rivera, O. Meza	Instituto de Física, BUAP
11:20-11:40 AM	RECESO			
11:40 a. m.	10PM	Efecto Goos-Hänchen para modos vibracionales acústicos y ópticos	D. Villegas, J. Arriaga, Z. Lazcano, R. Pérez-Álvarez, F. de León-Pérez	Departamento de Física, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Cuba
12:00 p. m.	1ST	Vórtices de corriente en moléculas aromáticas de carbono	Thomas Stegmann	Instituto de Ciencias Físicas, UNAM
12:20 p. m.	2ST	Nanoresonadores como polarizadores de valle	Walter Ortiz y Thomas Stegmann	Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas Universidad Nacional Autónoma de México
12:40 p. m.	1AT	Bombeo topológico de alto orden en una red de Sierpinsky	Marco Antonio Diaz Villarreal, José Eduardo Barrios Vargas	Facultad de Ciencias, UNAM
01:00 p. m.	2AT	Fases geométricas y entrelazamiento cuántico en el modelo 1D Su-Schrieffer-Hegger	Leonardo A. Navarro-Labastida y F. Rojas	Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Departamento Física Teórica
1:20-4:00 PM	RECESO			
04:00 p. m.	1SS	Algo sobre estados electrodinámicos no estacionarios en superconductores tipo II	O. A. Hernández-Flores, C. E. Ávila-Crisóstomo, J. Gutiérrez-Gutiérrez, C. Romero-Salazar, R. CortesMaldonado	Universidad Autónoma Benito Juárez de Oaxaca, Escuela de Sistemas Biológicos e Innovación Tecnológica.
04:20 p. m.	2SS	EFFECTO DEL NEODIMIO EN LAS PROPIEDADES DE LA DOBLE PEROVSKITA Sr ₂ -yNd _y Fe _{1+x} Mo _{1-x} O ₆ (PARA y EN EL RANGO 0-0.4)	T. E. Soto, Bertha O. Aguilar R, O. Navarro	Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM
04:40 p. m.	3SS	Dependencia en la temperatura del factor de corrección de van der Pauw	Polito-Lucas, J.A., González-Ronquillo, A.L., GarcíaVázquez, V.	Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla
05:00 p. m.	4SS	Simulación numérica del efecto del apantallamiento magnético y del corte de líneas flujo en una muestra superconductoras de PbIn	Raúl Cortés Maldonado, Omar Augusto Hernández Flores y Carolina Romero Salazar	Tecnológico Nacional de México, IT de Apizaco, Departamento de Eléctrica-Electrónica
5:20-5:40 PM	RECESO			
05:40 p. m.	11NE	Propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres de Si con Li y Na sustitucional aplicado a baterías recargables	J.P.A. Chávez Segura, J. Rebollo, F. Salazar, A. Trejo, y M.C. Irisson	Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán
06:00 p. m.	4NE	Efectos del Na intersticial en las propiedades electrónicas de nanoalambres de Si pasivados con H	L. G. Arellano, F. Salazar, A. Miranda, A. Trejo-Baños, L. A. Pérez, J. Nakamura and M. Cruz-Irisson	Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán
06:20 p. m.	14NE	Aprendizaje supervisado y no supervisado para la determinación de las características morfológicas de nanocubos de plata	Jesús Andrés Arzola Flores y Ana Lilia González Ronquillo	Instituto de Física, BUAP
6:40 p.m.	Clausura			

Mensaje de bienvenida

Es bien sabido que la física del estado sólido, es la disciplina de la Física que ha permitido el gran desarrollo tecnológico que tenemos en la actualidad. La comunidad científica mexicana desempeñando sus labores de investigación en esta disciplina, es de las más activas y numerosa entre la comunidad de Físicos en nuestro país, y la calidad de la generación de conocimientos generada por estos científicos es reconocida a nivel internacional. Es esta la novena reunión anual de la División de Estado Sólido de la Sociedad Mexicana de Física (DES-SMF) que se lleva a cabo desde la reactivación de dicha división.

En esta edición, la División de Estado Sólido otorga un reconocimiento al Dr. Rubén Gerardo Barrera y Pérez, del Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México por su gran aportación a la ciencia de nuestro país, en particular a la Física de Estado Sólido. ¡Enhorabuena Dr. Rubén Barrera!

Dadas las condiciones actuales que se vive en nuestro país por la pandemia COVID-19 debido al virus SARS-COV-2, en esta ocasión las actividades de la novena reunión de División de Estado Sólido, se llevarán a cabo en línea, teniendo como sede responsable el Instituto de Física de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla. Esperamos que mediante las presentaciones en línea, podamos intercambiar puntos de vista, esperamos también que nuestras actividades de investigación se enriquezcan y se puedan establecer nuevas colaboraciones académicas que fortalezcan la comunidad científica de la División.

De antemano agradezco el esfuerzo y entusiasmo de cada uno de los participantes en la presente reunión.

Dr. J Jesús Arriaga Rodríguez
Presidente de la DES-SMF 2021-2023

Índice general

Programa de la Reunión Anual de la División de Estado Sólido 2021, SMF	I
Mensaje de bienvenida	V
Índice general	VI
1 Conferencias invitadas	1
2 Sistemas bidimensionales	5
3 Nanoestructuras	23
4 Primeros Principios	39
5 Propiedades magnéticas, térmicas, electrónicas y ópticas en sólidos	43
6 Semiconductores	55
7 Sistemas amorfos	59
8 Superconductividad	63
9 Spintrónica	69
10 Aislantes topológicos	73

1 | Conferencias invitadas

Metamateriales piezoelectromagnéticos

F. Pérez-Rodríguez^{1*}, A. Konovalenko¹ y N.M. Makarov²

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

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

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

Palabras clave: Metamateriales, cristales electromagnetoelásticos

En la plática se revisará la teoría de homogeneización no-local para cristales electromagnetoelásticos en los cuales las ondas elásticas y electromagnéticas se acoplan mediante los efectos piezoeléctrico y/o piezomagnético. La teoría es útil para el estudio de la relación de dispersión de los modos de cristales electromagnetoelásticos homogeneizados. Además, la teoría permite calcular los parámetros efectivos para cada modo, a saber, la densidad de masa efectiva, el tensor de flexibilidad efectivo, así como la permeabilidad y la permitividad electromagnetoelásticas efectivas. La respuesta efectiva del cristal piezoelectromagnético homogeneizado (es decir, el metamaterial piezoelectromagnético) es no-local debido a que los elementos de todos los tensores de la respuesta electromagnetoelástica efectivos dependen tanto del vector de onda de Bloch como de la frecuencia. Con base en esta teoría de homogeneización, la estructura de bandas fotónicas-fonónicas de cristales piezoelectromagnéticos se ha podido describir incluso más allá del límite de grandes longitudes de onda, donde los efectos no-locales son importantes. La aplicación de la teoría de homogeneización se ilustra con el análisis de las estructuras de bandas y de los parámetros efectivos para superredes formadas por bicapas piezoléctrico-semiconductor, piezomagnético-semiconductor, y piezoelectromagnéticas.

Agradecimientos

Se agradece el apoyo del Instituto de Física de la BUAP y de CONACyT.

Disociación de excitones en dispositivos fotovoltaicos orgánicos

Fernando Sánchez^{1,2}, Carlos Amador-Bedolla², Vicenta Sánchez³ y Chumin Wang^{1,*}

¹Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México

²Departamento de Física y Química Teórica, Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México

³Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México

* Autor de correspondencia: chumin@unam.mx

Palabras clave: Modelo de Hubbard; Eficiencia cuántica; Renormalización en espacio real

La luz solar tiene el potencial de resolver los problemas energéticos actuales y futuros de la sociedad moderna, dado que en una hora la tierra recibe del sol la suficiente energía para satisfacer lo que la humanidad necesita en un año [1]. La flexibilidad mecánica, transparencia óptica, reducido peso y bajo costo de las celdas solares orgánicas han motivado una intensa investigación en los últimos años [2]. Su limitada eficiencia de conversión energética actual en comparación con la de celdas inorgánicas, se debe al escaso conocimiento del mecanismo de disociación excitónica en su compleja estructura molecular.

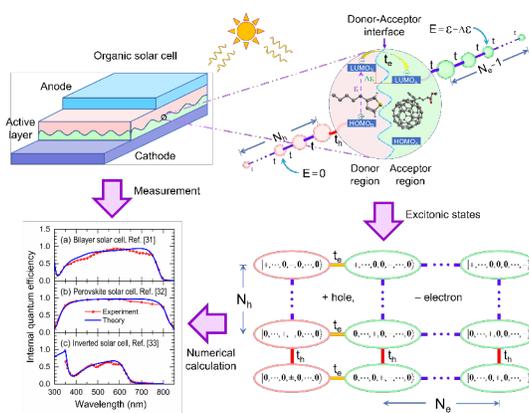


Fig. 1: (Panel sup.) Esquema de una celda solar orgánica y en la amplificación se muestran los niveles energéticos (HOMO, LUMO) de las moléculas donadoras yceptoras, así como los canales de escape para electrones (círculos verdes) y huecos (círculos rosados). (Panel inf. der.) Red cuadrada de excitones obtenida del modelo de Hubbard atractivo. (Panel inf. izq.) Eficiencia cuántica interna (IQE) teórica (líneas azules) comparada con los datos experimentales (puntos rojos) obtenidos tres tipos de celdas solares orgánicas.

En este trabajo estudiamos la difusión, disociación y recombinación de los pares electrón-hueco, conocido como excitones, fotogenerados en celdas solares orgánicas, así como sus efectos en la eficiencia cuántica interna (IQE) y en la corriente de corto circuito (J_{sc}). Para ello, partimos de un hamiltoniano de Hubbard que incluye la interacción coulombiana entre electrón y hueco tanto local (U) como no locales (V, W) alrededor de las fotoceldas moleculares, las cuales están conectadas a dos largas cadenas para las difusiones tanto de los electrones como de los huecos [3]. Los estados excitónicos pueden organizarse como una red cuadrada (ver Panel inf. der. de la Fig. 1), donde se aplica el método de canales independientes en combinación con la renormalización en espacio real [4].

Los resultados obtenidos muestran un incremento de IQE derivado de un desdoblamiento de la banda excitónica, cuando se introduce una diferencia de energía entre las moléculas donadoras yceptoras [5]. Asimismo, el estudio de multifotoceldas moleculares revela una óptima distancia entre fotoceldas para alcanzar la máxima IQE, en concordancia con los resultados experimentales [6]. Finalmente, los resultados teóricos de IQE y J_{sc} tienen una muy buena coincidencia con los datos experimentales obtenidos de tres tipos de dispositivos fotovoltaicos orgánicos, cuyo grado de polimerización puede determinarse a través del presente estudio [7].

Referencias

- [1] J. M. Luther y J. C. Johnson, Nature 571, 38-39 (2019). [2] J. Gao, J. Wang, C. Xu, Z. Hu, X. Ma, X. Zhang, L. Niu, J. Zhang y F. Zhang, Solar RRL 4, 2000364 (26pp) (2020). [3] T. N. Aram, A. Asgari, M. Ernzerhof, P. Quémerais y D. Mayou, EPJ Photovolt. 8, 85503 (8pp) (2017). [4] V. Sánchez y C. Wang, Symmetry 12, 430 (21pp) (2020). [5] F. Sánchez, C. Amador-Bedolla, V. Sánchez y C. Wang, Physica B: Condensed Matter 583, 412052 (8pp) (2020). [6] F. Sánchez, C. Amador-Bedolla, V. Sánchez y C. Wang, J. Phys. Chem. Solids 152, 109966 (8pp) (2021). [7] F. Sánchez, V. Sánchez y C. Wang, Nanomaterials 11, 495 (13pp) (2021).

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente financiado por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) a través del proyecto 252943 y por la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) a través de los proyectos PAPIIT-IN115519 y PAPIIT-IN110020. Los cálculos fueron realizados en Miztli-UNAM. F.S. agradece las becas postdoctorales de DGAPA-UNAM (2018-2020) y de CONACyT (2020-2021).

2 | **Sistemas bidimensionales**

Modelado del almacenamiento de hidrógeno en monocapa de GeC decorada con Cu, Ag y Au

Lucia G. Arellano^{1,2*}, Francisco De Santiago¹, Álvaro Miranda¹, Luis A. Pérez², Jun Nakamura³ 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, A. P. 20-364, 01000, Ciudad de México, México

³Department of Engineering Science, The University of Electro-Communications (UEC Tokyo), 1-5-1 Chofugaoka, Chofu, Tokyo 182-8585, Japan

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

Palabras clave: Carburo de Germanio, Almacenamiento de hidrógeno, Metales de transición

Actualmente, las fuentes de energía son un tema importante para la humanidad, debido a la preocupación por el agotamiento de los combustibles fósiles y la contaminación ambiental. El uso del hidrógeno como fuente de energía es una solución, siendo un combustible renovable, limpio, abundante y no tóxico [1,2]. Los materiales 2D son muy prometedores como medio de almacenamiento de hidrógeno, debido a su gran superficie por unidad de volumen [3-7]. En este trabajo, se lleva a cabo un estudio basado en la teoría de los funcionales de la densidad para explorar la fisisorción de H₂ en la monocapa de carburo de germanio (GeC-ML) decorada con metales de transición (TM) (Cu, Ag y Au). Los resultados de la energía de adsorción muestran que los átomos metálicos de Au y Cu prefieren ser quimisorbidos en el átomo de carbono, mientras que Ag se adsorbe sobre el enlace Ge-C. Todos crean estados con espín polarizado dentro de la banda prohibida de GeC. Las moléculas de H₂ interactúan fuertemente con el metal, y surge un alargamiento de la distancia H — H. Las bajas energías de transferencia y adsorción de carga indican fisisorción de H₂ al metal, y la interacción se produce principalmente entre la densidad de carga en el enlace H-H y el metal cargado positivamente. En el caso de Ag decorado en GeC-ML, se encontró la máxima capacidad de adsorción de siete moléculas de hidrógeno. Se espera que este trabajo sirva de base y aliente el estudio teórico y experimental de la monocapa de GeC y materiales 2D relacionados para el almacenamiento de energía.

Referencias

- [1] S. Niaz, T. Manzoor and A. H. Pandith, *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, 50, 457-469 (2015).
- [2] M. Nagpal and R. Kakkar, *International Journal of Hydrogen Energy* 43, 12168-12188 (2018).
- [3] R. Rahimi and M. Solimannejad, *International Journal of Hydrogen Energy* 45, 19465-19478 (2020).
- [4] P. Panigrahi, A. Kumar, A. Karton, R. Ahuja and T. Hussain, *International journal of hydrogen energy* 45, 3035-3045 (2020).
- [5] L. G. Arellano, F. de Santiago, A. Miranda, F. Salazar, A. Trejo, L. A. Pérez and M. Cruz-Irisson, *International Journal of Hydrogen Energy* (2020).
- [6] X. Li, X. Tan, Q. Xue and S. Smith, *International Journal of Hydrogen Energy* 44, 20150-20157 (2019).
- [7] Y. Wang, R. Zheng, H. Gao, J. Zhang, B. Xu, Q. Sun and Y. Jia, *Metal adatoms-decorated silicene as hydrogen storage media. International journal of hydrogen energy* 39, 14027-14032 (2014).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado parcialmente por los proyectos multidisciplinarios IPN-SIP 2020-2093, -2091, - 2106, 2021-0236 y UNAM-PAPIIT IN109320. Las simulaciones se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC-UNAM (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180 y -381) y Laboratorio Nacional de Supercomputación del Sureste de México. L.G.A. y F.S. agradece a CONACYT y BEIFI-IPN por su apoyo financiero.

Rendimiento termoeléctrico mejorado en bicapa de grafeno por las resonancias Fano e híbridas

J. A. Briones-Torres^{1*}, R. Pérez-Álvarez^{1,2}, S. Molina-Valdovinos¹ y I. Rodríguez-Vargas¹

¹Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Carretera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, Ejido La Escondida 98160, Zacatecas, Zac., México.

²Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Centro de Investigación en Ciencias, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa 62209, Cuernavaca, Morelos, México. *Autor de correspondencia: jabt0123@gmail.com

Palabras clave: Bicapa de grafeno, Resonancias Fano, Resonancias híbridas, Termoelectricidad.

Las resonancias Fano e híbridas son un efecto exótico que se presenta en la bicapa de grafeno [1,2,3], las primeras se deben a la superposición de ondas propagantes y ondas evanescentes-divergentes, mientras que las segundas se deben al acoplamiento entre resonancias Fano y estados resonantes en sistemas de dos o más barreras. Ambas resonancias presentan un perfil especial que es sensible al ángulo de incidencia y que sólo ocurre a ángulos cercanos a la incidencia normal [1,2]. Su huella es identificable en las propiedades de transporte de superredes basadas en bicapa de grafeno [1], esto abre la posibilidad de analizar si las resonancias Fano e híbridas pueden o no mejorar el rendimiento termoeléctrico en tales sistemas. En el presente trabajo presentamos las propiedades de transporte y termoeléctricas en sistemas de una y dos barreras basados en bicapa de grafeno y analizamos si las resonancias Fano e híbridas mejoran las propiedades termoeléctricas de la bicapa de grafeno. Haremos uso de una metodología basada en los formalismos de Landauer-Büttiker, de Sturm-Liouville y la matriz híbrida [1,4,5].

Referencias

- [1] J. A. Briones-Torres, I. Rodríguez-Vargas, Scientific Reports 7, 16708 (2017).
- [2] C. Sinha, R. Biswas, Phys. Rev. B. 84, 155439 (2011).
- [3] E. McCann, M. Koshino, Rep. Prog. Phys. 76, 056503 (2013).
- [4] R. Pérez-Álvarez, R. Pernas-Salomón, V. R. Velasco, SIAM J. Appl. Math. 75, 1403 (2015).
- [5] Supriyo Datta, Lessons from Nanoelectronics: A New Perspective on Transport-basic concepts (Vol. 5). World Scientific publishing company, 2017.

Agradecimientos

Se agradece a: CONACyT por la beca posdoctoral otorgada al Dr. José Alberto Briones Torres y la beca Sabática del Dr. Rolando Pérez Álvarez y a la Universidad Autónoma de Zacatecas por la hospitalidad de los Doctores José Alberto Briones Torres y Rolando Pérez Álvarez.

Almacenamiento de hidrógeno en SiGe pristino y BSiGe decorados con metales

Brandom Jhoseph Cid¹, Akari Nayarama Sosa¹, Álvaro Miranda^{1*}, Luis A. Pérez², Fernando Salazar¹ y Miguel Cruz-Irisson¹

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

²Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Física, C.P. 04510, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: amirandad.ipn@gmail.com

Palabras clave: Almacenamiento de H₂, DFT.

En los últimos años, el hidrógeno ha despertado un gran interés en ser usado como combustible limpio debido a las propiedades que posee, sin embargo, el almacenamiento de este sigue siendo un tema de estudio. En este trabajo fueron estudiados dos escenarios para mejorar la capacidad de almacenamiento de H₂ en una monocapa de SiGe mediante cálculos a primeros principios, empleando la teoría del funcional de la densidad. El primer escenario consiste en decorar con un átomo de Li, Sc o Ti la monocapa de siligeno pristina (SiGe) y el segundo en decorar la monocapa dopada con un átomo de B (BSiGe) con los mismos metales. Los resultados obtenidos indican que se pueden adsorber un máximo de 3H₂, 5H₂ y 4H₂ para los casos decorados con Li, Sc y Ti respectivamente en la monocapa SiGe y hasta 4H₂, 5H₂ y 4H₂ en los casos de la monocapa BSiGe, esto denota un aumento en la capacidad de adsorción en el caso de BSiGe-Li. Sin embargo, no hay diferencia para los casos decorados con Sc y Ti. Estos resultados indican que el siligeno dopado con B, puedes ser usado como medio de almacenamiento de hidrógeno [1,2].

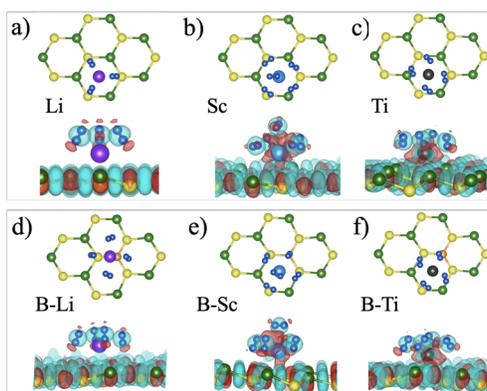


Fig. 1: Máximas capacidades y densidades de carga para a) SiGe-Li, b) SiGe-Sc, c) SiGe-Ti, d) BSiGe-Li, e) BSiGe-Sc y f) BSiGe-Ti.

Referencias

- [1] B.J. Cid, A.N. Sosa, Á. Miranda, et al. *Materials Letters* 293, 129743 (2021). <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.129743>
 [2] A.N. Sosa, B.J. Cid, Á. Miranda, et al., *International Journal of Hydrogen Energy* (2021). <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.10.175>

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado parcialmente por los proyectos multidisciplinarios IPN-SIP 2020-2093, 2020-2091, 2021-0236 y UNAM-PAPIIT IN109320. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Mitzli de DGTIC-UNAM (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180). B.J.C. y A.N.S. agradecen a CONACYT y BEIFI-IPN por su apoyo financiero.

Irradiación de bicapas de grafeno

Navarro-Espino, M.* y Barrios-Vargas, J.E.

Facultad de Química, Departamento de Física y Química Teórica, UNAM, 04510 CDMX, México.

*Autor de correspondencia: monsene10@gmail.com

Palabras clave: Materiales 2D, Grafeno, Twistronica, Floquet, Bicapas de grafeno.

En este trabajo se exploran nuevas fases electrónicas en una bicapa de grafeno desencadenadas por la rotación relativa de dos capas (Fig. 1). Se calculó la estructura de bandas y la densidad de estados resolviendo un Hamiltoniano continuo de bajas energías [1] para la bicapa rotada. Además, para enriquecer las propiedades del material, se añadió al sistema la interacción con iluminación láser empleando la teoría Floquet [2], como se realizó anteriormente para la monocapa de grafeno [3].

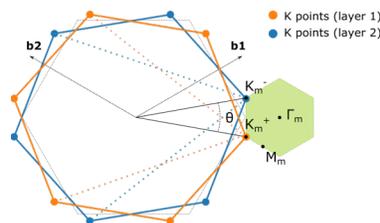


Fig. 1: Geometría en el espacio de momentos para la bicapa de grafeno rotada. (Naranja y azul) Primera zona de Brillouin de cada capa rotada. (Verde) Primera zona de Brillouin de la bicapa rotada.

Referencias

- [1] R. Bistritzer y A.H. MacDonald, PNAS, 30, 12233-12237 (2011).
- [2] G. Usaj, P. M. Perez-Piskunow, L. E. F. Foa Torres y C. A. Balseiro, Phys. Rev. B, 11, 115423 (2014).
- [3] T. Oka y H. Aoki, Phys. Rev. B, 8, 081406 (2009).

Agradecimientos

Este trabajo recibió apoyo del programa UNAM/DGAPA/PAPIIT IA103419 y del Subprograma 127 "Formación Básica en Investigación" de la Facultad de Química, UNAM.

Análisis de dos cadenas de Fibonacci acopladas

E. Huipe-Domratcheva¹ y O. Navarro¹

¹Universidad Nacional Autónoma de México, Unidad Morelia, Instituto de Investigación en Materiales, antigua carretera a Pátzcuaro #8701, Colonia Exhacienda de San José de la Huerta, 58190, Morelia, Michoacán, México.

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

Palabras clave: Bicapa, cuasiperiódico.

El apilamiento de capas en un material se ha estudiado en el caso periódico con el grafeno, siliceno y germaneno, donde surgen nuevas características distintas a las de una sola capa [1]. En este trabajo, estudiamos el comportamiento espectral desde la aproximación del Hamiltoniano de amarre fuerte de dos cadenas de Fibonacci paralelas, con un parámetro de salto t entre ambas cadenas, y con la posibilidad de experimentar una dislocación de arista. Cuando $t=0$, reproducimos el caso de una cadena unidimensional, pero cuando t es distinto de cero, se observan los efectos del acoplamiento en la densidad de estados total.

Referencias

[1] Cao, Y., Fatemi, V., Demir, A. et al. Correlated insulator behaviour at half-filling in magic-angle graphene superlattices. Nature 556, 80–84 (2018).

Agradecimientos

Se agradece: El apoyo parcial del proyecto PAPIIT-DGAPA IN105019 de la UNAM.

Diseño y simulación de un biosensor para la detección de estrés oxidativo basado en MoS_2 bidimensional

Martínez-Angeles W. L.¹, González-Reynoso O.¹, Carbajal-Arizaga G. G.¹ y García-Ramírez M. A.^{2,3*}

¹ Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Departamento de Ingeniería Química, Blvd. Marcelino García Barragan 1421, 44430, Guadalajara, Jalisco, México

² Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Departamento de Electrónica, Blvd. Marcelino García Barragan 1421, 44430, Guadalajara, Jalisco, México

³ Universidad de Guadalajara, Laboratorio Nacional de Vivienda y Comunidades Sustentables, Centro Universitario de Arte, Arquitectura y Diseño, Czda. Independencia Nte. 5075, Huentitán el bajo, 44250, Guadalajara, Jalisco, México

*Autor de correspondencia: mario.garcia@academicos.udg.mx

Palabras clave: Peróxido de hidrógeno, MoS_2 , biosensor, Semiconductores, Materiales 2D.

El peróxido de hidrógeno (H_2O_2) es generado como subproducto de reacciones químicas en el cuerpo humano. Su determinación es vital debido a que se sugiere que éste está involucrado en el funcionamiento celular y transducción de señales, además de actuar como un marcador de estrés oxidativo implicado en el diagnóstico del envejecimiento así como del cáncer, trastornos cardiovasculares y neurodegenerativos [1, 2]. Para el propósito de cuantificar dicha reacción, materiales tales como disulfuro de molibdeno (MoS_2) han ganado interés recientemente, ya que muestran características que lo hacen de gran interés para el desarrollo de sensores, estas propiedades incluyen transparencia óptica, fotoluminiscencia, rápida capacidad de extinción, estabilidad acuosa, etc. Dichas propiedades pueden ser modificadas en función a su tamaño y forma, con el fin de evaluar reacciones bioquímicas de interés, por lo que en este trabajo se pretende diseñar y simular un sensor que nos permita medir las perturbaciones de voltaje-corriente que se generan por la actividad electrocatalítica de las nanopartículas de MoS_2 hacia la reducción de MoS_2 . El biosensor está formado por una heteroestructura conformada de silicio, dióxido de silicio, una capa de MoS_2 y dos electrodos de oro que sujetaran la plataforma de detección. La operación del dispositivo se basa en la actividad electrocatalítica que adquiere el detector al modificar su banda electrónica con base en el número de capas atómicas, conjuntamente la utilización del MoS_2 en su forma bidimensional dará como resultado un sensor de alta selectividad y bajo consumo de potencia ya que la relación superficie volumen promoverá la interacción de las moléculas del detector y el analito [3, 4].

Referencias

- [1] Hui Liu, Xing Su, Congyue Duan, Xiaonan Dong, and Zhenfeng Zhu. *Materials Letters*, 122:182–185, 2014.
- [2] Tanyuan Wang, Haichuan Zhu, Junqiao Zhuo, Zhiwei Zhu, Pagona Pa-pakonstantinou, Gennady Lubarsky, Jian Lin, and Meixian Li. *Analytical chemistry*, 85(21):10289–10295, 2013.
- [3] MK Md Arshad, Subash CB Gopinath, WMW Norhaimi, MFM Fathil, et al. *Biosensors and Bioelectronics*, 132:248–264, 2019.
- [4] Tahreem Nawz, Amna Safdar, Muzammil Hussain, Dae Sung Lee, and Muhammad Siyar. *Crystals*. 10(10):902, 2020.

Agradecimientos

Expresamos nuestro agradecimiento al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (CONACYT) por su apoyo bajo la Beca 1023006, así como al Departamento de Química y los Laboratorios de Metabolismo y Bioinformática de la Universidad de Guadalajara campus CUCEI.

Uniones pnp de fosforeno como guías de ondas perfectas

Yonatan Betancur Ocampo*, Emmanuel Paredes Rocha y Thomas Stegmann

¹ Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad s/n, Col. Chamilpa, Cuernavaca, Morelos, C.P. 62210, México

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

Palabras clave: fosforeno, guía de ondas..

El flujo de corriente de electrones es considerado en las uniones pnp de fosforeno. En las paredes del canal, se produce reflexiones totalmente omnidireccionales, llamado anti-súper tunelamiento de Klein. Este efecto que es debido al bloqueo del pseudo-espín, difiere de la reflexión total interna, que es causada por regiones energéticamente prohibidas. El anti-súper tunelamiento de Klein confina los electrones dentro de la unión, para así obtener una guía de ondas de electrones perfecta. Calculamos el flujo de corriente con el método de las funciones de Green fuera del equilibrio, y observamos que los haces de electrones se propagan a través de la guía como los haces de luz en una fibra óptica. La guía perfecta funciona para todos los ángulos de incidencia debido a que la reflexión total no depende de la existencia de un ángulo crítico. En las regiones de baja energía y en uniones estrechas, encontramos modos inducidos en la guía de ondas. Este dispositivo opera sin pérdidas para una orientación específica de la unión con respecto a la red cristalina. En orientaciones arbitrarias pueden presentarse fugas de corriente, pero disminuyen notoriamente con ángulos de incidencia rasantes y para estados electrónicos en la región de baja energía. Estructuras formadas por múltiples guías dividen y dirigen el flujo electrónico eficientemente en el fosforeno. Las guías de ondas perfectas pueden no solo tener aplicaciones en la nanoelectrónica, sino también en la tecnología de la información cuántica.

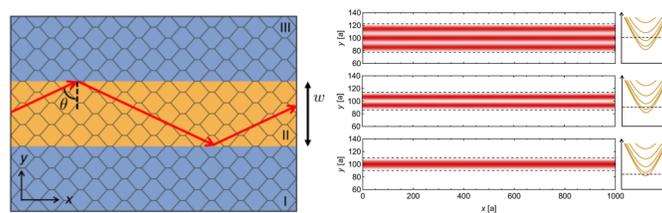


Fig. 1: Guía de ondas de electrones en el fosforeno y los tres primeros modos guiados inducidos en el canal.

Referencias

[1] Y. Betancur-Ocampo, E. Paredes-Rocha y T. Stegmann, *Journal of Applied Physics* 128, 114303 (2020).

Agradecimientos

Se agradece a: Proyecto CONACYT Fronteras 952, Proyecto CONACYT No. A1-S-13469, y la subvención para la investigación UNAM-PAPIIT No. IA-103020. E.P.-R agradece una beca de posgrado CONACYT.

Reduction of the Twisted Bilayer Graphene Chiral Hamiltonian into a 2x2 matrix operator and physical origin of at-bands at magic angles

Gerardo G. Naumis*, Leonardo A. Navarro-Labastida y Enrique Aguilar-Mendez

¹ Depto. de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) Apdo. Postal 20-364, 01000, CDMX, México.

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

Palabras clave: Bicapas de grafeno.

The chiral Hamiltonian for twisted graphene bilayers is written as a 2x2 matrix operator by a renormalization of the Hamiltonian that takes into account the particle-hole symmetry. This results in an effective Hamiltonian with an average field plus and effective non-Abelian gauge potential. The action of the proposed renormalization maps the zero-mode region into the ground state. Modes near zero energy have an antibonding nature in a triangular lattice. This leads to a phase-frustration effect associated with massive degeneration, and makes at-bands modes similar to confined modes observed in other bipartite lattices. Surprisingly, the proposed Hamiltonian renormalization suggests that at-bands at magic angles are akin to floppy-mode bands in flexible crystals or glasses, making an unexpected connection between rigidity topological theory and magic angle twisted two-dimensional heterostructures physics.

Estudio de la disociación de O₂ sobre monocapas de SnC decoradas con Au

Alma L. Marcos-Viquez^{1*}, Álvaro Miranda¹, Margarita C. Crisóstomo², Marbella Calvino¹, Miguel Cruz-Irisson¹ y Luis A. Pérez³

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

²Instituto Politécnico Nacional, CECYT 8 Narciso Bassols, Av. de las Granjas 628, C.P. 02519, Ciudad de México, México

³Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20364, 01000, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: almalorenamarca@gmail.com

Palabras clave: Monocapas de carburo de estaño, disociación de oxígeno

En este trabajo se estudia la interacción entre la molécula de oxígeno, O₂, y monocapas de carburo de estaño prístinas (2DSnC) y monocapas de carburo de estaño decoradas con Au (Au-2DSnC) por medio de cálculos DFT utilizando el código de SIESTA. Los resultados muestran que O₂ se adsorbe en 2DSnC con una energía de 0.95 eV. La molécula O₂ forma enlaces O-C y O-Sn, sin embargo, al estudiar la interacción entre O₂ y Au-2DSnC, ocurre una disociación espontánea de la molécula de oxígeno con una energía de 1.84 eV. La configuración final después de la interacción indica que los átomos de oxígeno forman enlaces con los estaños más cercanos compartiendo un enlace con el Au (ver Figura 1) [1].

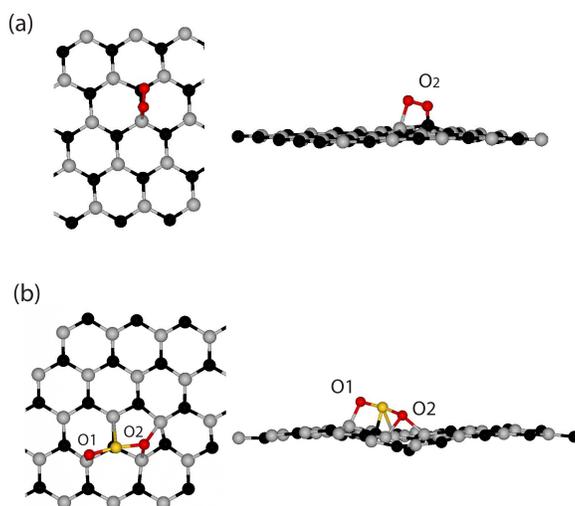


Fig. 1: a) Configuración final de la adsorción de O₂ sobre 2DSnC, b) disociación de O₂ sobre Au-2DSnC. Las esferas negras, grises, amarillas y rojas representan al carbono, estaño, oro y oxígeno, respectivamente.

Referencias

[1] Alma L Marcos-Viquez, Álvaro Miranda, C. Miguel Cruz-Irisson y Luis A. Pérez, Materials Letters 293, 129675 (2021).

Agradecimientos

Se agradece a BEIFI-IPN y a CONACyT por la beca escolar. Se agradece el apoyo de UNAM-PAPIIT IN109320, IPN-SIP 2020-2093, 2020-1494 y al proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180 por los recursos computacionales. Los cálculos fueron llevados a cabo en la super computadora de la UNAM, Miztli.

Localización de excitones por patrones de moiré en heterobicapas de dicalcogenuros de metales de transición

Isaac Soltero^{1,2*}, Francisco Mireles¹ y David A. Ruíz-Tijerina^{1, 3}

¹Universidad Nacional Autónoma de México, Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Departamento de Física, Apdo. Postal 14, 22800 Ensenada, Baja California, México

²Instituto Politécnico Nacional, Escuela Superior de Física y Matemáticas, Gustavo A. Madero, C.P. 07738 Ciudad de México, México

³Universidad Nacional Autónoma de México, Instituto de Física, Apdo. Postal 20-364, Ciudad de México 01000, México

*Autor de correspondencia: isochoa98@gmail.com

Palabras clave: excitones, patrones de moiré

Se presentan resultados teóricos del espectro de energía y propiedades ópticas de excitones intercapa localizados por potenciales de moiré en heterobicapas de dicalcogenuros de metales de transición. Se explotó la separación de escalas asociada al movimiento relativo y al movimiento del centro de masa para resolver numéricamente el sistema electrón-hueco en interacción localizado por un potencial trigonal. Se presenta el espectro de energía de excitones localizados para distintos pares de materiales y se clasifican de acuerdo de acuerdo a las representaciones irreducibles del grupo C_{3v} del potencial. Se obtuvieron reglas de selección para el acoplamiento entre estados mediante una perturbación que se transforma de acuerdo a una de las representaciones del grupo. Se encontró que la respuesta óptica de los excitones intercapa localizados por el potencial de moiré es dominada por los estados de la representación irreducible doblemente degenerada E [1]. Se presenta una estimación del espectro de absorción debido a estos estados.

Referencias

[1] Ruíz-Tijerina, D. A., Soltero, I., Mireles, F., Physical Review B 102, 195403 (2020).

Agradecimientos

I.S. agradece el apoyo de CONACYT a través de una beca de maestría.

ESTUDIO DE PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRÓNICAS DEL TELURIO (3D) y TELURENO (2D)

Gerardo Alejandro Montano González^{1,*}, Raúl Mauricio Torres Rojas², David Armando Contreras Solorio³ y Agustín Enciso Muñoz³

¹Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, Pedro de Alba, Niños Héroes, Ciudad Universitaria, 66451 San Nicolás de los Garza, N.L., Monterrey, México

²Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica de Física, Av. Solidaridad, Hidráulica, 98068 Zacatecas, Zac., Zacatecas, México

³Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica De Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Escondida, Campus UAZ Siglo XXI 98160 Zacatecas, México, Zacatecas, México

*Autor de correspondencia: gerardo.montanog@uanl.edu.mx

Palabras clave: Telurio, Telureno, Materiales 2D, DFT

El telurio tridimensional, es un material altamente anisotrópico que consiste en cadenas helicoidales de átomos con enlaces covalentes, estas cadenas se entrelazan a través de enlaces de van der Waals. Tiene propiedades muy interesantes como fotoconductividad, piezoelectricidad, termoelectricidad, etc. Con múltiples aplicaciones en dispositivos electrónicos.

Los materiales 2D prometen ser la clave para la nueva revolución tecnológica, por su gran número de posibles aplicaciones novedosas debida a sus propiedades únicas. El telureno, fase bidimensional del telurio, fue sintetizado en el 2017 por investigadores de la universidad de Purdue [1]. Posee una estructura que permite una alta absorción óptica, gran estabilidad en el medio ambiente, así como gran capacidad de transporte de energía. Tiene prometedoras aplicaciones en transistores de efecto campo, fotodetectores, sensores químicos, celdas solares, entre otras. Este material en sus diferentes alótopos ha mostrado un aumento de la brecha de energía desde 0.15eV en 3D-Te hasta 0.7eV en α -Te y 1.2 eV en β -Te.

En este trabajo, haciendo uso de la teoría funcional de la densidad (DFT) así como del código Wien2k, calculamos las propiedades estructurales y electrónicas del telurio 3D (3D-Te) y de las dos fases más estables del telureno (2D-Te), la α -Te y β -Te.

Referencias

[1] Zhu Z L, Cai X L, Yi S, et al. Multivalency-driven formation of Tebased monolayer materials: A combined first-principles and experimental study. Phys Rev Lett, 119, 106101, 2017

Agradecimientos

Agradecemos el tiempo computacional otorgado por LANCAD y CONACYT en las supercomputadoras Yoltila / Miztli / Xihucoatl en LSVP UAMIZtapalapa / DGTIC UNAM / CGSTIC CINVESTAV.

Óptica electrónica de gradiente de índice en uniones pn de grafeno

Emmanuel Paredes Rocha^{1*}, Yonatan Betancur Ocampo¹, Nikodem Szpak² y Thomas Stegmann¹

¹Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, México ²Facultad de Física, Universidad Duisburg-Essen, Duisburg, Alemania *Autor de correspondencia: eparedes@icf.unam.mx

Palabras clave: Óptica electrónica, Uniones pn de grafeno, dispositivos nanoelectrónicos.

Investigamos el transporte electrónico en uniones pn suaves de grafeno, generadas por potenciales electrostáticos que varían gradualmente. Los patrones de flujo de corriente coherente calculados numéricamente pueden ser entendidos en gran medida en términos de trayectorias semiclásicas, equivalentes a las obtenidas para haces de luz en medios con un índice de gradiente que cambia gradualmente. En las uniones suaves, emergen regiones energéticamente prohibidas, las cuales incrementan la reflexión y pueden generar patrones de interferencia pronunciados, por ejemplo, modos de galería susurrante. Los dispositivos investigados no sólo demuestran la factibilidad de la óptica electrónica de gradiente de índice en uniones pn de grafeno, como es el caso de las lentes de Luneburg y Maxwell (fig. 1), sino que pueden tener distintas aplicaciones tecnológicas, como por ejemplo divisores de haz, focalizadores o guías de onda. Las trayectorias semiclásicas ofrecen una eficiente herramienta para estimar el camino del flujo de corriente en estos dispositivos de la nanoelectrónica.

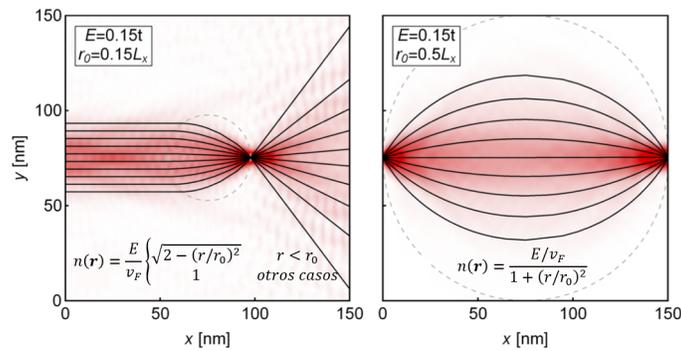


Fig. 1: Flujo de corriente en una lente de Luneburg (izquierda) y ojo de pescado de Maxwell (derecha) hecha en grafeno. El correspondiente índice de refracción gradual y sus trayectorias semiclásicas son mostradas para cada lente.

Referencias

[1] Paredes Rocha et. al, Phys. Rev. B 103, 045404 (2021)

Agradecimientos

EPR agradece a CONACYT por la beca de posgrado. Se agradece el financiamiento a los proyectos CONACYT A1-S-13469 y UNAM-PAPIIT IA103020.

Transporte electrónico en pocas capas de fosforeno

Armando Q. Arciniega-Gutiérrez^{1*}, Thomas Stegmann²

¹Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México ²Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, México *Autor de correspondencia: armandoarciniega@ciencias.unam.mx

Palabras clave: Fosforeno, transporte, tunelaje Klein.

El Fosforeno es un material bidimensional con una estructura hexagonal muy parecida a la del grafeno aunque el Fosforeno presenta un escalonamiento entre algunos de sus átomos. A partir del estudio realizado en [1] para una sola capa de Fosforeno se ha continuado el estudio para un número de capas superior. Debido a la alta anisotropía de las bandas de energía de este material los electrones a través del Fosforeno tienen diferentes comportamientos los cuales se han estudiado para varias capas. Además de esto se ha agregado un dopaje al Fosforeno y se ha estudiado el transporte electrónico. Se ha observado que en varias capas de Fosforeno el efecto de tunelaje Anti-Super-Klein se mantiene presente. Este efecto consiste en una reflexión total y omnidireccional de electrones en presencia de un dopaje PN.

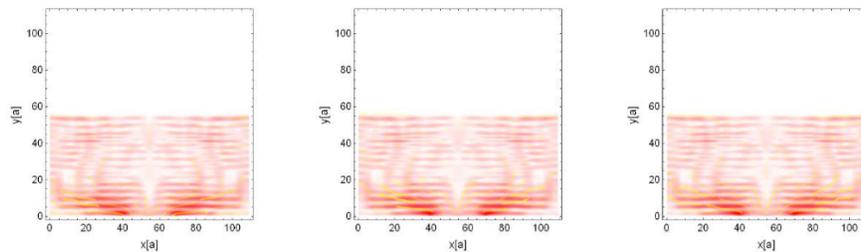


Fig. 1: Densidad de corriente a través de una cinta triple de Fosforeno. Se observa el efecto de tunelaje Anti-Super-Klein.

Referencias

[1] Y. Betancur-Ocampo, F. Leyvraz y T. Stegmann, Nano Letters 19, 7760 (2019)

Agradecimientos

Se agradece el financiamiento a los proyectos CONACYT A1-S-13469 y UNAM-PAPIIT IA103020.

Transporte cuántico y termoelectricidad en estructuras complejas de grafeno

R. Rodríguez-González^{1*}, L. M. Gaggero-Sager² y I. Rodríguez-Vargas¹

¹ Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Carretera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, Ejido La Escondida, 98160 Zacatecas, Zac., México.

² Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209, Cuernavaca, Morelos, México. *Autor de correspondencia: rodriguezglez.r@gmail.com

Palabras clave: Transporte auto-similar, Termoelectricidad, Estructura complejas, Campo magnético, Reglas de escala.

Los efectos del campo magnético han sido fundamentales para revelar varios fenómenos exóticos en materiales 2D tales como el efecto Klein, la mariposa de Hofstadter, la refracción negativa y los fermiones Brown-Zak por mencionar algunos. En este trabajo mostramos que el grafeno exhibe un transporte auto-similar una vez que el material es nanoestructurado con un campo magnético de manera compleja. En concreto, las barreras magnéticas se distribuyen de acuerdo con las reglas del conjunto Cantor. Las propiedades de transmisión, transporte y termoeléctricas se calculan con el método de la matriz de transferencia, el formalismo de Landauer-Büttiker y la fórmula de Cluter-Mott, respectivamente. La auto-similaridad se refleja en los espectros de conductancia y el coeficiente de Seebeck para diferentes parámetros estructurales como lo es el número de generación, la intensidad del campo magnético, la altura de la barrera y la longitud total del sistema. Además, se obtienen reglas de escala bien definidas, que describen bastante bien la escalabilidad entre patrones auto-similares. También comparamos los patrones auto-similares de estructuras complejas magnéticas con los correspondientes a estructuras complejas magneto-eléctricas, encontrando una mejor escalabilidad para las primeras. Es importante señalar que hasta donde hemos corroborado, la ruptura de la simetría asociada al campo magnético es primordial para obtener el transporte auto-similar. Por último, podemos decir que las estructuras magnéticas complejas constituyen una excelente opción para corroborar el fenómeno exótico del transporte auto-similar.

Agradecimientos

R.R.-G. agradece a CONACYT-SEP México por la beca de investigación postdoctoral. I.R.-V. quisiera agradecer a CONACYT-SEP México por el apoyo financiero a través del proyecto A1-S-11655.

Efectos termoeléctricos en estructuras complejas de grafeno: electrones masivos y no masivos

R. Rodríguez-González^{1*}, L. M. Gaggero-Sager² y I. Rodríguez-Vargas¹

¹Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Carretera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, Ejido La Escondida, 98160 Zacatecas, Zac., México.

²Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

*Autor de correspondencia: rodriguezglez.r@gmail.com

Palabras clave: Termoelectricidad, Electrones masivos y no masivos, Reglas de escala, Sustratos nanoestructurados.

Este trabajo tiene como objetivo estudiar la escalabilidad de las propiedades termoeléctricas y de transporte en estructuras complejas de grafeno basadas en sustratos nanoestructurados que generan regiones masivas y sin masa debido a la ruptura de la simetría de la subred. Los portadores de carga en este tipo de sistema de baja dimensión son descritos por el hamiltoniano tipo Dirac. Este hamiltoniano implica el carácter masivo de las partículas. La distribución auto-similar de barreras y pozos está dada por las reglas que dan origen al conjunto de Cantor. Utilizamos el método de la matriz de transferencia, el formalismo de Landauer-Büttiker y la fórmula de Cluter-Mott para calcular la transmisión, la conductancia y el coeficiente de Seebeck, respectivamente. Hemos propuesto ecuaciones de escala que a la vez se convierten en una herramienta útil para reproducir aproximadamente los espectros auto-similares a diferentes escalas. En este contexto, se aplica una derivación numérica y analítica para la conductancia y el coeficiente de Seebeck, respectivamente. Además, se presenta una ecuación de escala general para cada propiedad física estudiada. Finalmente, podemos afirmar que las estructuras complejas formadas por la conjunción de regiones masivas y sin masa para la propagación de portadores de carga son cruciales para tener una propiedad no convencional, en materiales 2D, como la auto-semejanza, que se refleja de alguna manera en la conductancia y el coeficiente de Seebeck.

Agradecimientos

R.R.-G. agradece a CONACYT-SEP México por la beca de investigación postdoctoral. I.R.-V. quisiera agradecer a CONACYT-SEP México por el apoyo financiero a través del proyecto A1-S-11655.

Reflectometría a 45° de hojuelas de MoS₂ sobre sustrato

Samantha Pérez-Díaz^{1*}, Enrique Quiroga-González¹ y Felipe Pérez-Rodríguez¹

¹Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Post. J-48 72570, Puebla, Pue., México.

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

Palabras clave: Materiales bidimensionales, reflectometría de 45 grados.

El primer material bidimensional que se logró aislar exitosamente en un laboratorio fue el Grafeno, abriéndose con este hecho la puerta a la física de una nueva clase de materiales. El grafeno llamó particularmente la atención debido a que su comportamiento en forma tridimensional (grafito) es muy distinto en comparación al que se observa cuando se encuentra en forma bidimensional. Por esta razón, se han buscado otros materiales bidimensionales con características prometedoras. Entre ellos se encuentran los Dicalcogenuros de Metales en Transición (TMDs) que tienen 3 capas atómicas [1].

En este trabajo hemos calculado espectros ópticos de MoS₂ bidimensional sobre sustrato. Específicamente se calcularon espectros de la reflectometría a 45° dados por la diferencia de la reflectividad para polarización p menos el cuadrado de la reflectividad para polarización s a un ángulo de incidencia de 45 grados, es decir,

$$\Delta_{45} = R_p - R_s^2$$

Estos espectros proporcionan información sobre la función dieléctrica de láminas ultra delgadas sobre sustrato, ya que exhiben picos asociados a resonancias en la permitividad transversal, así como mínimos debidos a resonancias en la función de pérdidas de energía, o sea, a ceros de la componente longitudinal de la permitividad [2]. Con fines comparativos, se presentan los espectros de la reflectometría de 45 grados de una lámina bidimensional compuesta de múltiples hojuelas de MoS₂ inmersas en una matriz de aire, con una fracción de llenado de $f=0.3$. En el cálculo de estos espectros se aplicó el modelo de medio efectivo de Maxwell-Garnett [3]. Los espectros obtenidos se comparan en la figura 1.

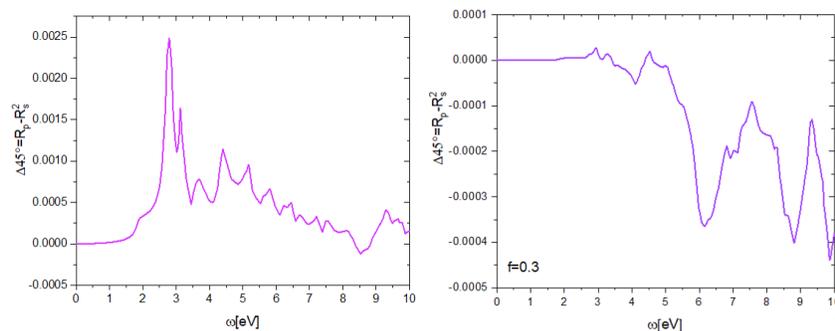


Fig. 1: Comparación entre los espectros para una lámina homogénea de MoS₂ y otra con una fracción $f = 0.3$ de MoS₂ en aire.

Referencias

- [1] H. Zhao, Q. Guo, F. Xia and W. Han, Nanophotonics 4, 128 (2015).
- [2] A. Silva-Castillo and F. Pérez-Rodríguez, Phys. Stat. Sol. (b) 219, 215, (2000)
- [3] V. A. Markel, Journal of the Optical Society of America A 33, 1244 (2016).

Agradecimientos

Se agradece a: El instituto de Física de la BUAP y al CONACyT.

3 | Nanoestructuras

Adsorción de urea en nanoalambres de silicio decorados para un potencial diagnóstico de uremia

José Eduardo Santana¹, Francisco de Santiago¹, María Isabel Iturrios², Álvaro Miranda^{1*}, Luis Antonio Pérez³, Miguel Cruz-Irisson¹

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

²Instituto Politécnico Nacional, CECYT 8 Narciso Bassols, Av. de las Granjas 628, C.P. 02519, Ciudad de México, México

³Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20364, 01000, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: jesantanas1700@alumno.ipn.mx

Palabras clave: Urea, Uremia, Sensor, Nanoalambre de Si

Las altas concentraciones de urea en el cuerpo humano podrían ser un indicativo de uremia, que es un síntoma de un fallo en los riñones. En este trabajo, investigamos el efecto de la adsorción de urea en nanoalambres de silicio decorados con Ag, Au y Cu (SiNW). Consideramos SiNWs crecidos a lo largo de la dirección [100] con superficies expuestas (110) y pasivados con hidrógeno [1, 2]. Para los SiNW decorados con un metal, un átomo de pasivación de H en la superficie de SiNW se reemplaza por un átomo de Au, Ag o Cu, que se usa como sitio de adsorción para la molécula de urea. Los resultados muestran que los SiNW metalizados son capaces de adsorber la molécula de urea, teniendo la energía de adsorción más alta para el caso de Cu, seguido de los casos de Ag y Au. La adsorción de urea en el SiNW decorado con metal modifica los estados electrónicos dentro de las bandas de valencia y conducción, esta hibridación confirma que la molécula de urea es adsorbida por el SiNW metalizado. Además, un cambio notable en la función trabajo de los sistemas, provocado por la adsorción de urea, podría permitir la detección de la molécula. Estas nanoestructuras podrían usarse para la captura y detección de urea, lo que podría conducir a un posible dispositivo electrónico para el diagnóstico de uremia. [3]

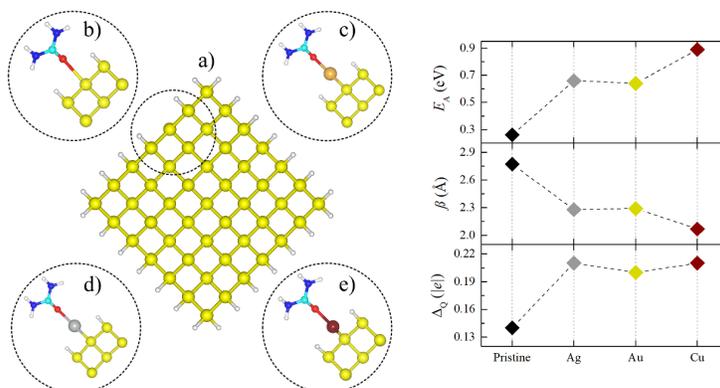


Fig. 1: a) Sección transversal Sección transversal de un SiNW hidrogenado con un DB, y configuraciones más estables de urea adsorbidas en SiNW prístinos y metalizados con c) Au, d) Ag y f) Cu. Energía de adsorción (E_A), distancia de enlace (β) y transferencia de carga (ΔQ) de los sistemas estudiados.

Referencias

- [1] de Santiago, F., Santana, J. E., Miranda, Á., Trejo, A., Vázquez-Medina, R., Pérez, L. A., & Cruz-Irisson, M. Quasi-one-dimensional silicon nanostructures for gas molecule adsorption: a DFT investigation. *Applied Surface Science*, 475, 278-284, (2019).
- [2] de Santiago, F., Santana, J. E., Miranda, Á., Pérez, L. A., Rurali, R., & Cruz-Irisson, M. Silicon nanowires as acetone-adsorptive media for diabetes diagnosis. *Applied Surface Science*, 547, 149175, (2021).
- [3] Santana, J. E., de Santiago, F., Iturrios, M. I., Miranda, Á., Pérez, L. A., & Cruz-Irisson, M. (2019). Adsorption of urea on metal-functionalized Si nanowires for a potential uremia diagnosis: a DFT study. *Materials Letters*, en revisión, (2021).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por UNAM-PAPIIT IN109320 e IPN-SIP 2020-2093, 2020-1494. Los cálculos se han realizado en la supercomputadora Miztli de DGTIC-UNAM (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180). J.E.S. y F.D.S. quisiera agradecer a CONACYT y BEIFI-IPN por su apoyo financiero.

OBTENCIÓN DE GRAFENO MULTICAPA A PARTIR DE SUBPRODUCTOS DE NANOTUBOS DE CARBONO

F. G. Granados^{1*}, B. O. Aguilar¹ y O. Navarro¹

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

*Autor de correspondencia: granadosmartinezfg@gmail.com

Palabras clave: Nanoestructuras, Difracción de Rayos X

Han pasado varios años desde que surgió un gran interés por investigar las nanoestructuras de carbono, comenzando por la síntesis de los fullerenos, siguiendo los nanotubos de carbono y la exfoliación del grafeno [1-3]. Conforme se adentró en su investigación, se concibieron maneras de aprovechar las propiedades únicas en distintas aplicaciones. En la actualidad, para promover su uso, se busca el escalamiento de los procesos de producción, con lo cual surgen distintas problemáticas referentes al uso de solventes, precursores tóxicos, procesos de múltiples pasos que aumentan el precio base de producción y también se tienen que considerar los subproductos que se generan durante la síntesis. Hay distintos planteamientos para solucionar estos problemas, que están enfocados en alguna de las distintas etapas mencionadas anteriormente como el que abordó Ding et al. [4]. En la presente investigación se sintetizaron nanotubos de carbono y se utilizaron los subproductos formados en la síntesis para posteriormente obtener estructuras de grafeno y óxido de grafeno. El método a seguir fue utilizando peróxido de benzoilo y peróxido de hidrógeno con diferentes concentraciones. Se hicieron distintos tratamientos a los subproductos de carbono. Las estructuras inicialmente contaban con una estructura cristalina bien definida en el plano 002, referente a las hojas de grafeno apiladas, de acuerdo a la Difracción de Rayos X. Después de realizar los procedimientos se comenzaron a notar dos comportamientos, por un lado, una disminución en la intensidad de la señal del plano previamente mencionado y, por otro lado, un corrimiento de 12° en la señal 2θ , que nos indica un aumento en el distanciamiento interplanar. A través de esta metodología, utilizando solventes de baja toxicidad, se ha comenzado a lograr el objetivo de descapamiento y formación de grafeno multicapa. En esta etapa de la investigación se continuarán variando las condiciones con la finalidad de lograr obtener grafeno con el menor número de capas posibles para su posterior utilización.

Referencias

- [1] H.W. Kroto, J.R. Heath, S.C. O'Brien, R.F. Curl, R.E. Smalley, Nature, 318, 6042 (1985).
- [2] S. Iijima, Nature 354, 6348 (1991).
- [3] K.S. Novoselov, A.K. Geim, S.V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S.V. Dubonos, I.V. Grigorieva, A. A. Firsov, Science, 306, 5696 (2004).
- [4] Y. Ding, M. Zeng, L. Fu, Science Bulletin, 64, 24 (2019).

Agradecimientos

Se agradece el apoyo al PAPIIT-UNAM, por la beca posdoctoral otorgada.

Efectos del litio en las propiedades electrónicas del Ge poroso como material anódico para baterías

Akari Narayama Sosa^{1*}, Israel González¹, Alejandro Trejo¹, Álvaro Miranda¹, Fernando Salazar¹ y Miguel Cruz Irisson¹

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

*Autor de correspondencia: asosacamposeco@gmail.com

Palabras clave: germanio poroso, DFT

Recientemente, la necesidad de mejorar el almacenamiento de energía ha llevado al desarrollo de baterías de litio con materiales porosos como electrodos. El germanio poroso (pGe) se ha mostrado prometedor para el desarrollo de baterías de iones de litio de nueva generación debido a sus excelentes propiedades electrónicas y químicas, sin embargo, el efecto del litio en sus propiedades no se ha estudiado ampliamente [1]. En este trabajo, se estudió el efecto del Li superficial e intersticial sobre las propiedades electrónicas de pGe utilizando un esquema a primeros principios basado en la teoría del funcional de la densidad. Las estructuras porosas se modelaron eliminando columnas de átomos en la dirección [001] y los enlaces sueltos de la superficie se pasivaron con átomos de H y luego se reemplazaron con átomos de Li. Además, se analizó el efecto de un solo Li intersticial en el pGe. El estado de transición y la barrera de difusión del Li en la estructura del pGe se estudiaron utilizando un esquema QST (tránsito sincrónico cuadrático) [2].

Referencias

- [1] K. Mishra, X.-C. Liu, F.-S. Ke, X.-D. Zhou, *Compos. Part B* 163, 158 (2019).
[2] W. Wan, Q. Zhang, Y. Cui, E. Wang, *J. Phys.: Condens. Matter* 22, 415501 (2010).

Agradecimientos

This work was supported by multidisciplinary projects from SIP-IPN. A.N.S. and I.G. acknowledges the fellowship from CONACYT and BEIFI-IPN.

Efectos del Na intersticial en las propiedades electrónicas de nanoalambres de Si pasivados con H

L. G. Arellano^{1,2}, F. Salazar^{1,*}, A. Miranda¹, A. Trejo-Baños¹, L. A. Pérez², J. Nakamura³ y M. Cruz-Irisson¹

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

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

³Department of Engineering Science, The University of Electro-Communications (UEC Tokyo), 1-5-1 Chofugaoka, Chofu, Tokyo 182-8585, Japan

*Autor de correspondencia: fsalazarp@ipn.mx

Palabras clave: Nanoalambres de Silicio, Baterías de Sodio, Teoría del Funcional de la Densidad

A pesar de que los materiales para el diseño de baterías de litio (Li) se han estudiado extensamente [1-4], las alternativas como las baterías de sodio (Na), cuyo funcionamiento es el mismo que el de las de Li, han adquirido un gran interés debido a la abundancia de Na en comparación con el Li. La investigación de nuevos materiales anódicos para estas baterías de Na es aún escasa [5]. En este trabajo se presenta un estudio teórico de las propiedades electrónicas de un nanoalambre semiconductor de silicio, con un diámetro de 1.7 nm, pasivado con hidrógeno (H-SiNW), crecido en la dirección cristalográfica [001] y considerando entre 1 y 12 átomos de Na intersticiales por celda unitaria. Los resultados revelan que el efecto del Na en las propiedades electrónicas del nanoalambre es una transición de semiconductor a metálico, incluso para el caso de un solo átomo de Na. La energía de formación, aumenta como función de la concentración de átomos de Na, revelando una pérdida de estabilidad energética debido a que los radios atómicos de los átomos de Na modifican fuertemente los enlaces Si-Si en el nanoalambre. Por otro lado, el efecto de remover los átomos de Na del nanoalambre es un H-SiNW semiconductor con un cambio estructural para concentraciones de 10 y 12 átomos de Na y una brecha de energía menor a la del H-SiNW inicial. Estos resultados indican que se puede obtener una transición semiconductor-metal-semiconductor mediante la inserción / extracción de átomos de Na en el H-SiNW y que existe una concentración crítica de Na para la cual la estructura del nanoalambre sufre cambios estructurales irreversibles. Estos resultados abren la posibilidad de considerar los H-SiNW como potenciales materiales anódicos en baterías recargables de sodio.

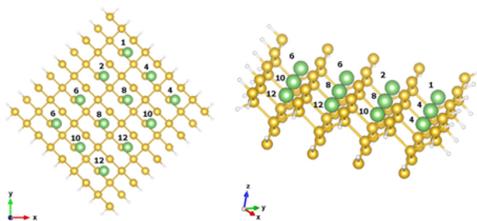


Fig. 1: Vistas superior (izquierda) y lateral (derecha) del H-SiNW. Las esferas amarillas, blancas y verdes representan los átomos de Si, H y Na, respectivamente. Los números en los átomos de Na, indican la secuencia mediante la cual se insertaron en el nanoalambre.

Referencias

- [1] F. De Santiago, et al., *Energy Storage Materials* 20 (2019) 438–445.
- [2] M. I. James, A. S. Prakash, *Journal of Power Sources* 378, 268-300 (2018).
- [3] F. Salazar, L. A. Pérez, M. Cruz-Irisson, *Solid State Communications* 247, 6-11 (2016).
- [4] L. F. Cui, et al., *Nano letters* 9, 491-495 (2009).
- [5] S. P. Ong, et al., *Energy & Environmental Science* 4, 3680-3688 (2011).

Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por los proyectos IPN 2020-2091, 2093, 2106. Lo cálculos se realizaron en la supercomputadora miztli a través del proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180 y el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS) a través del proyecto 20193082N. L.G.A agradece el apoyo financiero de BEIFI-IPN y CONACYT.

Nanoestructuras metálicas obtenidas por síntesis verde

L. F. López-Vázquez¹, M. Cortez-Valadez²

¹Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora. Apdo. Postal 5-88, 83190, Hermosillo, Son. México

²CONACYT- Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora. Apdo. Postal 5-88, 83190, Hermosillo, Son. México

*Autor de correspondencia: manuelcortez@live.com

En este trabajo se incluyen resultados novedosos para la obtención de nanoestructuras metálicas considerando diversos precursores y utilizando extractos de plantas como agente reductor. Se presenta una variedad de geometrías y morfologías nanoestructuradas, donde en algunos casos los parámetros estructurales pueden ser dependientes de los parámetros de configuración del método de síntesis. Los resultados consideran la aplicación de este tipo de métodos para la obtención de nanoestructuras bimetálicas. El estudio de las propiedades ópticas de absorción y propiedades vibracionales en la espectroscopia Raman son analizadas. Son identificadas las bandas de absorción en el espectro Uv-Vis asociadas a la presencia de la resonancia del plasmón de superficie. Así como una identificación en la región de amplificación de la espectroscopia Raman (efecto SERS) sobre moléculas de prueba.

Análisis numérico de una nano-estructura semiconductor para aplicaciones bio-médicas, la cual co-integra NEMS con tecnología MOS

García-Ramírez, M. A.^{1,5*}, González-Reynoso, O.², Martínez-Angeles, W. L.², Vargas-Rodríguez, E.³, Guzmán-Chávez, A.D.³ y Bello-Jiménez, M. A.⁴

¹Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Depto. de Electrónica, Blvd. Marcelino García Barragán 1421, 44430, Guadalajara, Jalisco, México

²Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Ciencias Exactas e Ingenierías, Depto. de Ing. Química, Blvd. Marcelino García Barragán 1421, 44430, Guadalajara, Jalisco, México

³Universidad de Guanajuato, Depto. de Estudios Multidisciplinarios, División de Ingenierías, Campus Irapuato-Salamanca, Av. Universidad s/n, 38940, Col Yacatitas, Yuriria, Guanajuato, México

⁴Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Instituto de Investigación en Comunicaciones Ópticas, Av. Karakorum 1470 Lomas 4ta sección, 78210, San Luis Potosí, México

⁵Universidad de Guadalajara, Laboratorio Nacional de Vivienda y Comunidades Sustentables, Centro Universitario de Arte, Arquitectura y Diseño, Czda. Independencia Nte. 5075, Huentitán el bajo, 44250, Guadalajara, Jalisco, México

*Autor de correspondencia: mario.garcia@academicos.udg.mx

Palabras clave: NEMS, Biosensores, Semiconductores, Nano-Estructuras, Análisis numérico

A partir de que la tecnología Metal-Óxido-Semiconductor (MOS) en uso llegó a su límite debido a problemas de escalamiento en la región de tuneo, la Ley de Moore dejó de ser referencia[1]. Por esta razón, se inició una migración para buscar nuevos materiales que pudiesen brindar características similares a las del Si, pero con la ventaja de seguir con el escalamiento, velocidad de conmutación, bajo consumo de potencia, etc. Por esta razón y para dar paso a qué la nueva tecnología madurara, se planteó la co-integración de dos tipos de tecnología disimilar como lo son los sistemas nano-electromecánicos (NEMS) con la tecnología MOS. De esta manera surgieron las estructuras híbridas, las cuales brindan características superiores a las estructuras "normales". En este trabajo se presenta un análisis numérico en el cual se realiza la co-integración de dichas tecnologías en una nano-estructura para aplicaciones bio-médicas.

Referencias

[1] International Technology Roadmap for Semiconductors, www.itrs2007.org, (2007).

Agradecimientos

Expresamos nuestro agradecimiento al Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología de México (CONACYT) por su apoyo bajo la Beca 1023006, así como al Departamento de Química y los Laboratorios de Metabolismo y Bioinformática de la Universidad de Guadalajara campus CUCEI.

Ultranarrow heterojunctions of armchair graphene nanoribbons as resonant-tunnelling devices

Francisco Sánchez-Ochoa^{1*}, G. Canto², Gregorio H. Coccoletzi³ y Michael Springborg⁴

¹Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, Cd. de México 01000, Mexico.

²Centro de Investigación en Corrosión, Universidad Autónoma de Campeche, Av. Héroe de Nacozari 480, 24079 Campeche, Campeche, Mexico

³Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla 72570, Mexico

⁴Physical and Theoretical Chemistry, University of Saarland, 66123 Saarbrücken, Germany

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

Palabras clave: DFT, Green's functions, Graphene nanoribbons, Transport properties

An investigation is performed on the electronic transport properties of armchair-graphene nanoribbon (AGNR) heterojunctions using spin-polarized density functional theory calculations in combination with the non-equilibrium Green's function formalism [1]. 9-AGNR and 5-AGNR structures are used to form a single-well configuration by sandwiching a 5-AGNR between two 9-AGNRs. At the same time, these 9-AGNRs are matched at the left and right to electrodes, 9 and 5 being the number of carbon dimers as width. First, we study the ground state properties, and then we calculate the electron transport properties of this device as a function of the well width. We show the presence of electronic tunnelling resonances between the barriers by delocalized electron density inside the well's structure. This is corroborated by transmission curves, localized densities of states (LDOS), current-vs-bias voltage results, and the trend of the resonances as a function of the well width. This work shows that AGNR heterojunctions may be used as resonant-tunnelling devices for applications in nanoelectronics [2].

Referencias

[1] F. Sánchez-Ochoa, et al., Phys.Chem.Chem.Phys. 21, 24867 (2019). [2] F. Sánchez-Ochoa, et al., Chemical Modelling: Volume 16, 100-126 (2021).

Agradecimientos

Numerical calculations were carried out using the computer facilities at the Instituto de Física (BUAP).

Biosíntesis de nanobarras de hematita a partir de la planta de savila “Aloe ciliaris”

J. León-Flores^{1*}, M. Martínez Mondragon^{1,2}, Roberto Henandez Reyes¹, J. Barreto Renteria¹, S. Tehuacanero¹ y J. A. Arenas Alatorre¹

¹Instituto de Física, UNAM, Departamento de materia condensada, Av. Universidad No 3000, Circuito de la investigación científica, Ciudad Universitaria, México.

²Universidad Autónoma de chapingo, Carretera Federal México-Texcoco Km 38.5, Texcoco, México.

*Autor de correspondencia: jleon86@fisica.unam.mx

Palabras clave: Nanobarra, Biosíntesis

Se presenta la obtención de nanobarras de hematita a partir de la planta de sábila “Aloe ciliaris” mediante un método de biosíntesis con un proceso térmico de 2 horas a 60°C. Las nanobarras se observaron mediante TEM y la presencia de la fase hematita se identificó mediante HRTEM y EDS.

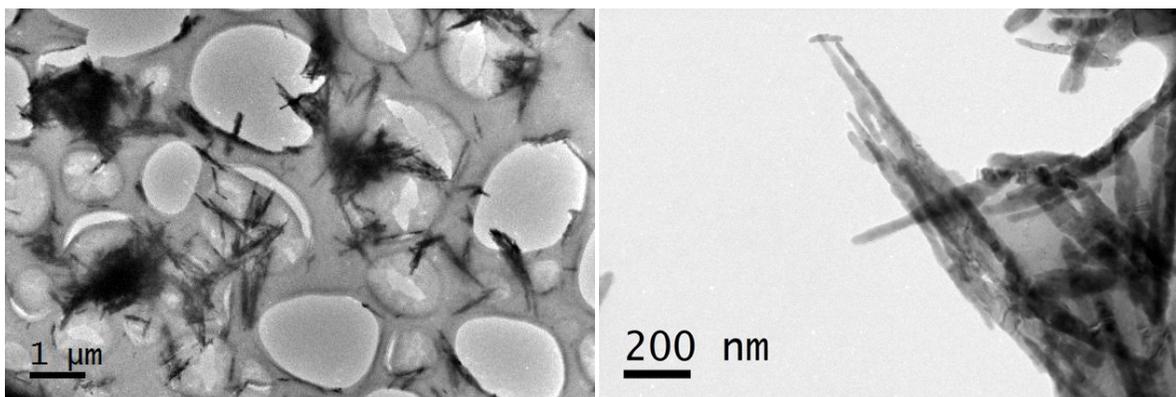


Fig. 1: Imágenes de TEM: Se observa la presencia de nanobarras de aproximadamente 800 nanómetros de longitud y 40 nm de ancho.

Agradecimientos

Se agradece a: Proyecto PAPIIT DGAPA-UNAM IN108418. J. León-Flores agradece el apoyo brindado mediante beca de estancia posdoctoral Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA) – Coordinación de la Investigación Científica (CIC): Programa de Becas Posdoctorales en la UNAM.

Adsorción de nucleobases de ADN/ARN en nanoalambres de silicio

Kevin J. García^{1*}, Jose E. Santana¹, María I. Iturrios², Margarita C. Crisóstomo², Alejandro Trejo¹, y Álvaro Miranda¹

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

²Instituto Politécnico Nacional, CECYT 8 Narciso Bassols, Av. de las Granjas 628, C.P. 02519, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: kevin.garcia.gin2020@gmail.com

Palabras clave: nanoalambre de silicio, nucleobases, ADN, DFT

El tipo de plataforma de detección en un nanobiosensor juega un papel importante en la detección de secuencias de ácidos nucleicos. Se ha demostrado que el grafeno no tiene una banda prohibida intrínseca; por lo tanto, los nanoalambres semiconductores son materiales deseables para la detección electrónica de nucleobases. Se estudió la adsorción de las nucleobases que componen el Ácido Desoxirribonucleico (ADN) y el Ácido Ribonucleico (ARN) (adenina (A), citosina (C), guanina (G), timina (T) y uracilo (U)) en nanoalambres de silicio (SiNW) (ver la Figura 1) mediante la teoría del funcional de la densidad (DFT). Se consideraron nanoalambres de silicio crecidos a lo largo de la dirección cristalográfica [111] [1,2,3]. Se analizaron las energías de adsorción entre el SiNW y las nucleobases, las distancias de enlace, transferencias de carga y densidades de carga. Las transferencias de carga entre el SiNW y la nucleobase adsorbida se estimaron utilizando un análisis de población de Voronoi. Además, se analizaron las estructuras de bandas electrónicas y las densidades de estados parciales. Se estudiaron los posibles sitios de enlace disponibles para cada una de las nucleobases, para (A) tres átomos de nitrógeno, para (C) un átomo de nitrógeno y un átomo de oxígeno, para (G) dos átomos de nitrógeno y un átomo de oxígeno, para (T) dos átomos de oxígeno y para (U) dos átomos de oxígeno. Los resultados muestran una gran interacción entre el SiNW y las nucleobases, el orden de las energías de adsorción es, en general, C>A>G>U>T. Además, las propiedades electrónicas muestran que existe una gran interacción entre las nucleobases y los nanoalambres, ya que presentan diferentes valores en las brechas de energía semiconductoras. Los resultados muestran que los SiNW pueden ser potencialmente usados para la detección de ADN y ARN.

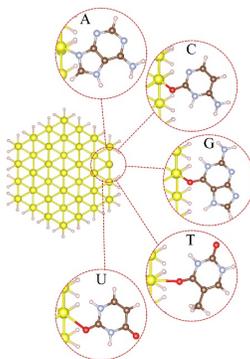


Fig. 1: Sección transversal del SiNW, se muestran las moléculas adsorbidas: adenina (A), citosina (C), guanina (G), timina (T) y uracilo (U).

Referencias

- [1] F. de Santiago, J. E. Santana, A. Miranda, L. A. Pérez R. Rurali y M. Cruz-Irison Applied Surface Science 547, 149175 (2021).
- [2] F. de Santiago, A. Trejo, A. Miranda, F. Salazar, E. Carvajal, L. A. Pérez y M. Cruz-Irison Nanotechnology 29, 204001 (2018).
- [3] A. Miranda, F. de Santiago, L. A. Pérez y M. Cruz-Irison, Sensors and Actuators B: Chemical 242, 1246-1250 (2017).

Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado parcialmente por los proyectos multidisciplinarios IPN-SIP 2020-2093, -2091, -2106, 2021-0236 y UNAM-PAPIIT IN109320. Las simulaciones se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC-UNAM (Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180 y -381). K. J. García y J. E. Santana agradecen la beca de posgrado del CONACYT y BEIFI del IPN.

Propiedades electrónicas de nanoalambres [001] de Ge con Li superficial

J.A.M. Banda^{1,*}, M. Crissotomo², F. Salazar², L. A. Pérez³ y M.C. Irisson¹

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Ciudad de México, México.

²Instituto Politécnico Nacional, CECYT NGB, Ciudad de México, México

³Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: jmorenob1200@alumno.ipn.mx

Palabras clave: Nanoalambres de Ge, baterías de Li, propiedades electrónicas, Teoría del Funcional de la Densidad

Se necesita de una nueva generación de baterías recargables con una mayor capacidad de almacenamiento, eficiencia y una vida útil que permita su uso para el almacenamiento de energía a gran escala. Los nanoalambres de Germanio (Ge) presentan una alta capacidad teórica de carga y son atractivos para el desarrollo de ánodos en baterías [1]. En este trabajo se estudian las propiedades electrónicas de nanoalambres de Ge pasivados con Hidrógeno (H) y crecidos en la dirección cristalográfica [001] con diferentes diámetros. El sistema se modela sustituyendo átomos de H por átomos de Litio (Li), de la nanoestructura [2]. El estudio se desarrolla usando la Teoría de la Funcional de la Densidad (DFT), en la aproximación de la densidad local (LDA) incorporado en el código SIESTA. Los resultados indican que los nanoalambres presentan el conocido efecto del confinamiento cuántico, en donde la brecha de energía disminuye como función del diámetro del nanoalambre. Adicionalmente, se observa un carácter semiconductor y que la brecha de energía disminuye como función de la concentración de átomos de Li. Particularmente, para el menor de los diámetros estudiados se determinó la máxima concentración de átomos de Li que la estructura puede tolerar antes de fracturarse, que es de seis Li por celda unitaria. Estos resultados ayudan a entender cómo se modifican las propiedades electrónicas y los cambios estructurales que sufren los nanoalambres de Ge debido a la incorporación de Li, abriendo la posibilidad de incorporarlos como materiales anódicos para el desarrollo de una nueva generación de baterías recargables de Li.

Referencias

[1] Kennedy T, Mullane E, Geaney H, Osiak M, O'Dwyer C, Ryan K M, Nano Lett. 14 716–23 (2014) [2] González-Macías Armando, et al., Nanotechnology 29, 15 8 p. (2018)

Agradecimientos

Este trabajo es financiado por el proyecto multidisciplinario 2020-2091, 20210239 de la Secretaría de Investigación y Posgrado del IPN. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC-UNAM (proyectos LANCAD-UNAM-DGTIC-180 y 381) y el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México de la BUAP.

Propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres de Si con Li y Na sustitucional aplicado a baterías recargables

J.P.A. Chávez Segura^{1*}, J. Rebollo², F. Salazar¹, A. Trejo¹, y M.C. Irisson¹

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

²Instituto Politécnico Nacional, CECYT CVM, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: jchavezs1501@alumno.ipn.mx

Palabras clave: Nanoalambres de Si, baterías de Li, baterías de Na, Teoría del Funcional de la Densidad.

Los nanoalambres de Silicio prometen el desarrollo de electrodos para baterías recargables con una mayor capacidad de almacenamiento de energía. En este trabajo se estudian las propiedades mecánicas y electrónicas de nanoalambres de Silicio (Si) pasivados con Hidrógeno (H), crecidos en la dirección cristalográfica [111]. El modelo consiste en sustituir sistemáticamente átomos de H por átomos de Litio (Li) y Sodio (Na) en nanoalambres de Si con cuatro diámetros diferentes. El estudio se realiza usando la teoría del funcional de la densidad (DFT) en la aproximación de la densidad local (LDA) incorporados en el código SIESTA. Los resultados indican que, a partir de la sustitución de un átomo de Li o de Na, la brecha de energía de los nanoalambres comienza a disminuir, manteniendo un comportamiento semiconductor para todos los diámetros estudiados [1]. El análisis de la energía de formación indica que los nanoalambres se hacen más estables como función de la concentración de Li o Na. Los resultados de la energía de enlace indican que se forman enlaces Li-Si y Na-Si, este resultado se confirma con el análisis poblacional de carga cuyos resultados indican que los Li y Na ceden carga a los átomos de Si. Finalmente, los resultados del módulo de Young, indican que para todos los nanoalambres estudiados su valor es casi constante como función de la concentración de Li o Na pero menor al del Si en bulto en la dirección [111] que es de 185 GPa [2]. Cabe mencionar, que el valor del módulo de Young se incrementa como función del diámetro del nanoalambre. Estos resultados muestran que los nanoalambres de Si podrían ser buenos candidatos para incorporarlos como materiales anódicos en baterías recargables de Li y Na.

Referencias

[1] F. Salazar, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson Solid State Communications 247 (2016) 6–11

[2] Samuel Hoffmann, Ivo Utke, Benedikt Moser, et al Nano Lett. (2006), 6, 4, 622–625

Agradecimientos

Este trabajo es financiado por el proyecto multidisciplinario 2020-2091, 20210239 de la Secretaría de Investigación y Posgrado del IPN. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC-UNAM (proyectos LANCAD-UNAM-DGTIC-180 y 381) y el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México de la BUAP.

Estudio teórico de las propiedades electrónicas de nanoalambres de Ge con Li

Tania Leal^{1,*}, I. Iturrios², F. Salazar¹, A. Miranda¹ y M. Cruz-Irisson¹

¹Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Ciudad de México, México. ²Instituto Politécnico Nacional, CECYT NGB, Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: tlealm2000@alumno.ipn.mx

Palabras clave: nanoalambres de Ge, baterías de Li, Propiedades electrónicas, Teoría del funcional de la densidad

La creciente demanda de energía, ha motivado el estudio de materiales para desarrollar baterías recargables de litio (Li) con un mejor desempeño en comparación con las baterías actuales. El Ge es un semiconductor que puede usarse como material anódico con una capacidad de almacenamiento superior al de las baterías actuales [1]. En este trabajo se estudian las propiedades electrónicas de un nanoalambre de germanio (Ge) pasivado con hidrógeno (H), crecido en la dirección cristalográfica [110], donde algunos átomos de H se sustituyen por Li. El estudio se desarrolla usando la teoría del funcional de densidad (DFT) en la aproximación de la densidad local (LDA) integrado en el código SIESTA. Los resultados indican que la brecha de energía se va cerrando al aumentar el número de litios por celda unitaria en el nanoalambre. La energía de formación disminuye conforme aumenta la concentración de átomos de litio, indicando que el sistema es energéticamente estable. La energía de enlace presenta un comportamiento casi constante como función de la concentración de átomos de Li. Finalmente, se determinó el número máximo de átomos de Li que el nanoalambre puede almacenar sin sufrir fracturas. Estos resultados ayudan a entender cómo se modifican las propiedades electrónicas y la estructura del nanoalambre como función del número de átomos de Li.

Referencias

[1] González-Macías Armando, et al., Nanotechnology 29, 15 8 p. (2018)

Agradecimientos

Este trabajo es financiado por el proyecto multidisciplinario 2020-2091, 20210239 de la Secretaría de Investigación y Posgrado del IPN. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC-UNAM (proyectos LANCAD-UNAM-DGTIC-180 y 381) y el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México de la BUAP.

Implementación de algoritmos de aprendizaje automático para la predicción de la resonancia del plasmón superficial en nanocubos de oro

Jesús Andrés Arzola Flores¹ y Ana Lilia González Ronquillo^{1*}

¹Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Instituto de Física, Av. San Claudio y Blvd. 18 Sur, Col. San Manuel, Puebla, Pue., México

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

Palabras clave: Aprendizaje automático, Resonancia del plasmón superficial.

Las nanopartículas de metales nobles poseen interesantes propiedades ópticas, específicamente, la resonancia del plasmón superficial (RPS). Hoy en día, gracias al desarrollo de las técnicas de síntesis, es posible sintonizar dichas propiedades ópticas modificando los parámetros morfológicos de las nanopartículas, por lo que estudiar el efecto de la morfología sobre las propiedades ópticas ha sido un tema de gran interés para los investigadores. Actualmente, gracias al desarrollo de la inteligencia artificial, específicamente del aprendizaje automático, es posible construir modelos capaces de predecir una gran cantidad de propiedades fisicoquímicas y ópticas de distintos materiales, empleando modelos de clasificación, regresión o clustering. Por lo que, en el presente trabajo se presenta una metodología para predecir la posición de la RSP de nanocubos de oro, como función de sus parámetros morfológicos (ver Fig. 1), empleando distintos modelos de aprendizaje automático, entre ellos un modelo de red neuronal perceptrón multicapa. Esta metodología nos ha permitido predecir la posición de la RSP con una exactitud del 94 % [1].

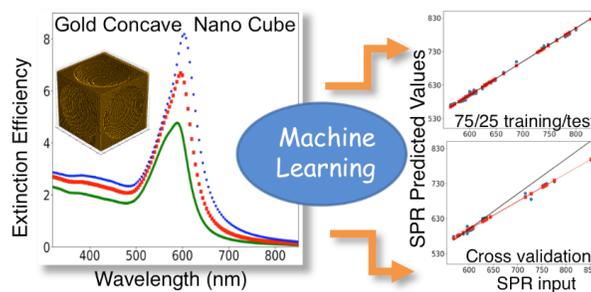


Fig. 1: Representación esquemática de la metodología empleada para la predicción de resonancia de plasmones de superficie.

Referencias

[1] J. A. Arzola, A.L. González, The Journal of Physical Chemistry C 124 (46), 25447-25454 (2020).

Aprendizaje supervisado y no supervisado para la determinación de las características morfológicas de nanocubos de plata

Jesús Andrés Arzola Flores¹ y Ana Lilia González Ronquillo^{1*}

¹Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Instituto de Física, Av. San Claudio y Blvd. 18 Sur, Col. San Manuel, Puebla, Pue., México

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

Palabras clave: Aprendizaje supervisado, aprendizaje no supervisado, espectroscopia UV-vis

Las nanopartículas (NPs) de plata han sido ampliamente estudiadas debido a su enorme campo de aplicación [1]. Su respuesta óptica, y por ende su aplicación, depende de sus características morfológicas, por lo que la determinación de éstas últimas es de gran necesidad [1].

Hoy en día, existe una gran diversidad de técnicas de microscopía para caracterizar la morfología, pero tienen la desventaja de no realizarse in situ, lo cual puede ser un inconveniente para la determinación de morfología de NPs en soluciones coloidales. Por otro lado, la espectroscopia UV-vis, no presenta ese inconveniente, además es fácil de implementar y relativamente económica en comparación con las técnicas de microscopía [2].

En el presente trabajo presentamos una metodología para predecir las propiedades morfológicas de nanocubos de plata a partir de su espectro de extinción. Para lo anterior, se utilizaron espectros ópticos para entrenar algoritmos de aprendizaje supervisado e implementar algoritmos de aprendizaje no supervisado [4], con la finalidad de predecir las características morfológicas de nanocubos de plata. Los espectros de extinción fueron obtenidos mediante la implementación numérica de la aproximación de dipolo discreto (DDSCAT) [3]. Esta metodología nos ha permitido realizar predicciones con una precisión superior al 98 %.

Referencias

- [1] X. F. Zhang, Z. G. Liu, W. Shen, and S. Gurunathan, International Journal of molecular sciences 17(9), 1534 (2016).
- [2] R. Desai, V. Mankad, S. K. Gupta, and P. K. Jha, Nanoscience and Nanotechnology Letters 4(1), 30-34 (2012).
- [3] B.T. Draine and P.J. Flatau, The Journal of the Optical Society of America 11, 1491-1499 (1994).
- [4] A. Dey, International Journal of Computer Science and Information Technologies 7(3), 1174-1179 (20126).

4 | Primeros Principios

Surface structures of magnetostrictive $D0_3$ - $Fe_3Ga(001)$

Ricardo Ruvalcaba^{1a}, Joseph P. Corbett², Andrada-Oana Mandru³, Noboru Takeuchi¹, Arthur R. Smith⁴, Jonathan Guerrero-Sanchez^{1b}

¹Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Universidad Nacional Autónoma de México, Ensenada, BC 22860, Mex.

²Department of Physics, the Ohio State University, Columbus, OH 43210, USA

³Empa, Swiss Federal Laboratories for Materials Science and Technology, Dübendorf CH-8600, Switzerland

⁴Nanoscale and Quantum Phenomena Institute—Department of Physics and Astronomy, Ohio University, Athens, OH 45701, United States of America

^aAutor de correspondencia: ag6_ruva17@ens.cnyn.unam.mx ^bAutor de correspondencia: bguerrero@cnyn.unam.mx

Palabras clave: Ga/Fe atomic exchange, strain, thermodynamic stability, magnetic moment enhancement.

First-principles total energy calculations and scanning tunneling microscopy experiments were performed to study the surface reconstruction on the magnetostrictive Fe_3Ga alloy. The inverse magnetostrictive behavior was evaluated in the bulk by compressing and stretching its lattice parameter, showing an increase in magnetic moments as strain increases. Surface analysis demonstrates two thermodynamically stable surfaces, the 1×1 and 3×1 . The 1×1 is an ideal FeGa terminated surface, whereas the 3×1 is also FeGa terminated but it has a first-layer Fe atom substituted by a Ga atom every three unit-cells, forming a row-like surface structure. Tersoff–Hamann scanning tunneling microscopy simulations were obtained and compared with experimental results. We found excellent agreement between theory and experiment, in which the distance between rows is $\sim 12.3 \text{ \AA}$. Theoretical findings suggest that the substrate-induced strain may increase the stability of the 3×1 reconstruction. Analysis of the magnetic moments in the reconstructions showed that their behavior is affected by a surface effect, as well as by the inverse magnetostriction of the structure. A good understanding of the atomic reconstructions of the magnetostrictive Fe_3Ga alloys is an important step towards the understanding of its surfaces. Also, Fe_3Ga is a potential candidate for perpendicular magnetic tunnel junctions due to the existing perpendicular magnetic anisotropy effect when grown on different substrates.

Agradecimientos

We thank DGAPA-UNAM projects IN101019 and IA100920 and CONACYT grants A1-S-9070 for partial financial support. Experimental part of this research supported by the US Department of Energy, Office of Basic Energy Sciences, Division of Materials Sciences and Engineering under Award No. DE-FG02-06ER46317. Calculations were performed in the DGTIC-UNAM supercomputing center project LANCAD-UNAM-DGTIC-368. The authors thankfully acknowledge the computer resources, technical expertise and support provided by the Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México, CONACYT member of the network of national laboratories. JGS acknowledges THUBAT KAAL IPICYT supercomputing center for computational resources. The authors would like to thank E. Murillo, and A. Rodriguez Guerrero for technical assistance and useful discussions. Image analysis was performed by Gwyddion software package.

Efecto de la longitud de la cadena lateral y las propiedades ópticas de los líquidos iónicos N-etil-N, N, N-trialquilamonio: un estudio ab-initio

M. A. Olea-Amezcu¹, J. E. Castellanos-Aguila^{2*}, H. Hernández-Cocoletzi³, E. Ferreira, M. Trejo-Durán⁵, O. Olivares-Xometl³, y Natalya V. Likhanova⁶

¹Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Escuela de Artes Plásticas y Audiovisuales, Vía Atlixcáyotl No. 2499, 72810 Puebla, Pue., México.

²Universidad de Guanajuato, División de Ingenierías, Campus Irapuato-Salamanca, Carr. Salamanca-Valle Km 3.5+1.8, Comunidad de Palo Blanco, 36700 Salamanca, Gto., México.

³Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Facultad de Ingeniería Química, Av. San Claudio y 18 Sur, Ciudad Universitaria, Col. San Manuel, 72570 Puebla, Pue., México.

⁴Universidad Autónoma de Nuevo León, Facultad de Ciencias Químicas, Av. Universidad S/N, San Nicolás de los Garza, 66455, Nuevo León, México. ⁵Universidad de Guanajuato, Departamento de Estudios Multidisciplinarios, Av. Yacatitas, S/N, Col. Yacatitas, 36940 Yuriria, Gto., México.

⁶Instituto Mexicano del Petróleo, Gerencia de Ingeniería de Recuperación Adicional, Eje Central Lázaro Cárdenas No. 152, Col. San Bartolo Atepehuacan, 07730 Ciudad de México, México.

*Autor de correspondencia: je.castellanos@ugto.mx

Palabras clave: DFT, Líquidos Iónicos, Propiedades Ópticas no lineales

En este trabajo se presentan las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas no lineales de los nuevos líquidos iónicos adipato de N-etil-N, N, N-trihexilamonio (CPA₆) y N-etil-N, N, N-trioctilamonio etil sulfato (ESA₈), los cuales han sido sintetizados previamente para aplicaciones anticorrosivas [1]. Se analizará el efecto de la longitud de las cadenas laterales de alquilo sobre los líquidos iónicos en el marco de la teoría funcional de la densidad. Además, la energía de interacción, el momento dipolar, la polarizabilidad y la hiperpolarizabilidad de los líquidos iónicos ESA_n y CPA_n ($n = 2, \dots, 14$) y los cationes correspondientes, muestran una fuerte dependencia del número de radicales etilo añadidos o eliminados de las cadenas laterales. La longitud de la cadena lateral del alquilo es un factor más importante que la interacción con el anión, donde el anión adipato presenta mejores valores de las propiedades ópticas no lineales con respecto al anión sulfato de etilo. Encontramos que los cationes exhiben una dependencia proporcional directa de n. Mientras tanto, a medida que aumenta n, las contribuciones aniónicas se vuelven insignificantes.

Referencias

[1] N. V. Likhanova, P. Arellanes-Lozada, O. Olivares-Xometl, H. Hernández-Cocoletzi, I. V. Lijanova, J. Arriola-Morales, and J. E. Castellanos-Águila, *Journal of Molecular Liquids* 279, 267-278 (2019).

5 | Propiedades magnéticas, térmicas, electrónicas y ópticas en sólidos

Semimetales Topológicos de Nudo Nodal

E. C. Velázquez-López^{1*} y J. E. Barrios-Vargas¹

¹Facultad de Química, Departamento de Física y Química Teórica, UNAM, 04510 Ciudad de México, México

*Autor de correspondencia: vleduardoc@ciencias.unam.mx

Palabras clave: Hamiltoniano continuo, semimetales, término de masa, nivel de Fermi.

La topología de bandas en física de materia condensada ha desarrollado estados exóticos, uno de ellos son los semimetales topológicos, sistemas donde las bandas de conducción y las bandas de valencias se intersecan, generando patrones en estos nodos. Una propuesta general para los semimetales topológicos es el modelo presentado en la referencia [1], donde se presenta uno de los semimetales de líneas nodales como energías a un hamiltoniano de Dirac perturbado, conservando simetría de inversión temporal, y el caso de una estabilidad de estos estados es considerando un hamiltoniano de dos niveles, donde la robustez está dada por el índice (winding number). Debido a la propuesta de [1] se han realizado distintos hamiltonianos, uno de ellos es presentado en [2], el cual realiza un sistema con simetría TP (Inversión temporal y Espacial) en el hamiltoniano continuo de dos niveles, la propuesta del vector d asociado al hamiltoniano, es un mapeo en la 4 esfera para generar los nudos de un toro y proponer hamiltonianos de red, en la izquierda de Fig 1 tenemos la energía de fermi para un modelo de red particular. Agregar un término de masa en el hamiltoniano de red, produce transiciones en los nudos nodales (Fig 1. derecha), estas transiciones cambian la topología del sistema, generando cambios en las estructuras de bandas y en el transporte.

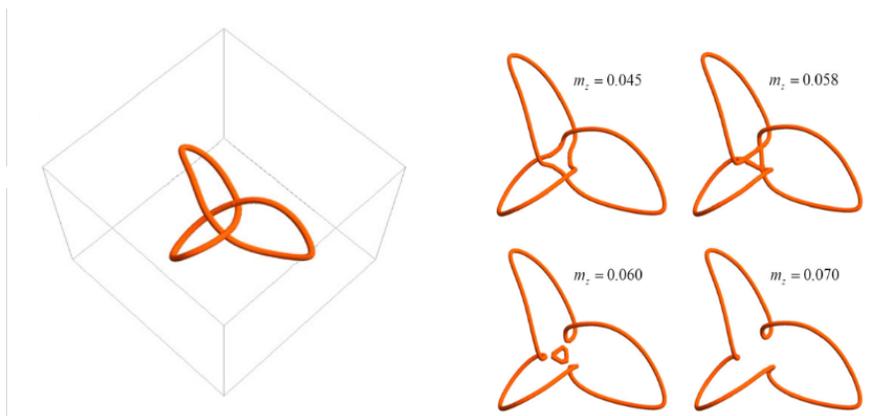


Fig. 1: Nivel de Fermi para un semimetal de nudo nodal, y las transiciones con un término de masa en un sistema de dos niveles [2].

Referencias

- [1] A. A. Burkov, M. D. Hook, y L. Balents, PHYSICAL REVIEW B 84, 235126 (2011).
[2] R. Bi, Z. Yan, L. Lu y Z. Wang, PHYSICAL REVIEW B 96, 201305(R) (2017).

Agradecimientos

Se agradece a: Los autores agradecen el financiamiento del proyecto CONACyT (Mexico) No. 428214.

Near and far optical properties of a cluster of six silver nanospheres using DDA method

Arturo Santos-Gomez^{1,2*} y Ana Lilia González¹

¹Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”, BUAP. Av. San Claudio y Blvd. 18 Sur, Col. San Manuel Edificios 1IF1, 1IF2 y 1IF3, Ciudad Universitaria, Puebla, México.

²TecNM Campus San Martín Texmelucan, División de Ing. Ambiental, Camino a la Barranca de Pesos s/n, San Lucas Atoyatenco, San Martín Texmelucan de Labastida, México.

*Autor de correspondencia: arturo.santos@smartin.tecnm.mx

Palabras clave: near field, far field, optical properties, metallic nanospheres

In this talk we present a numerical study of the far and near optical properties of a cluster of six silver spherical nanospheres in vacuum, with a radius of $r=4.5\text{nm}$, irradiated with a monochromatic plane wave, using the Discrete Dipole Approximation (DDA). The results reveal an asymmetric profile of the optical extinction when the distance of separation among the nanospheres are equal to $0.25r$, caused by the coupling of the dipolar resonance in each sphere and a new resonant mode of the cluster.

Cristales fotónicos dieléctrico-grafeno con celda unitaria de potencial químico no periódico

A. Sánchez-Arellano¹, D. Ariza-Flores², J. S. Pérez-Huerta¹, S. Amador-Alvarado³, I. A. Sustaita Torres⁴, J. Madrigal-Melchor¹

¹Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Carretera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, Ejido "La Escondida", Ciudad Universitaria Campus Siglo XXI., C.P. 98160, Zacatecas, Zac., Mexico.

²Conacyt-UASLP, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Karakorum 1470, Lomas 4ta Sección, C.P. 78210, San Luis Potosí, S. L. P., Mexico.

³CIICAp, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, Mexico.

⁴Unidad Académica de Ingeniería Eléctrica, Universidad Autónoma de Zacatecas, Av. Ramón López Velarde 801, Calle camino a la Bufa, C.P. 98000, Zacatecas, Zac., Mexico.

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

Palabras clave: grafeno, cristales fotónicos, Relación de dispersión, bandas de propagación

En este trabajo investigamos la banda fotónica de un nuevo tipo de cristal fotónico dieléctrico-grafeno con medio dieléctrico incrustado, que desempeña el papel de impureza. La celda unitaria consta de N láminas de grafeno incrustadas en medios dieléctricos isotrópicos, con el potencial químico de cada lámina de grafeno distribuido con valores discretos siguiendo perfiles del tipo gaussiano. Las bandas fotónicas, la relación de dispersión y el espectro de transmisión de las ondas electromagnéticas incidentes se calculan empleando el formalismo de la matriz de transferencia; además, la conductividad óptica del grafeno se emplea teniendo en cuenta tanto las contribuciones intra como interbanda. Encontramos que esta nueva estructura fotónica muestra una división de las bandas fotónicas en comparación con el cristal convencional, además, este tipo de estructura óptica muestra estados permitidos en la región de banda prohibida de baja frecuencia debido a la no homogeneidad en la celda unitaria, y estos estados se pueden ajustar mediante los valores del potencial químico en las láminas de grafeno de la celda unitaria [1,2,3,4].

Referencias

- [1] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim, The electronic properties of graphene, *Reviews of Modern Physics* 81 (1) (2009) 109–162 (2009). <https://doi.org/10.1103/RevModPhys.81.109>
- [2] L. A. Falkovsky, A. A. Varlamov, Space-time dispersion of graphene conductivity, *The European Physical Journal B* 56 (4) (2007) 281–284 (apr2007). <https://doi.org/10.1140/epjb/e2007-00142-3>. [3] L. A. Falkovsky, Optical properties of graphene, *Journal of Physics: Conference Series* 129 (1) (2008) 012004 (oct 2008). <https://doi.org/10.1088/1742-6596/129/1/012004> [4] Y. V. Bludov, N. M. R. Peres, M. I. Vasilevskiy, Unusual reflection of electromagnetic radiation from a stack of graphene layers at oblique incidence, *Journal of Optics* 15 (11) (2013) 114004:1–13 (2013). <https://orcid.org/0000-0001-9648-1459>

Agradecimientos

Sánchez Arellano agradece al CONACYT por haber apoyado con el otorgamiento de una beca para seguir con los estudios Doctorales.

Sintonización de la viscosidad efectiva en metamateriales acústicos

J. Doporto^{1*}, J. Arriaga¹ y M. Ibarias¹

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

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

Palabras clave: viscosidad, metamaterial acústico, cristal fonónico

Un metamaterial es un arreglo o estructura artificial, típicamente periódico, compuesto de pequeños meta-átomos que en el bulto se comportan como un medio continuo con propiedades efectivas no convencionales. Usualmente son compositos, en los cuales la estructura interna es usada para inducir propiedades efectivas en el material artificial que son sustancialmente diferentes a las encontradas en sus componentes. El término se originó del campo de los materiales EM, en donde los metamateriales fueron diseñados para controlar la propagación de la luz, ondas de radio y obtener un índice de refracción negativo [1] [2].

En 2004, Jensen Li y C. T. Chan publican la primera propuesta teórica que mostraba la existencia de un metamaterial acústico [3]. Años después, el interés por el estudio de metamateriales acústicos se intensificó, por lo que surgieron muchas propuestas teóricas y numéricas para explicar las propiedades físicas detrás de estos medios. Sin embargo, muchas de estas propuestas, no modelaban de forma correcta las pérdidas de energía existentes en los metamateriales, por lo que en los trabajos más recientes se empezó a sugerir la importancia de tomar en cuenta las pérdidas por viscosidad para un correcto modelado de las propiedades físicas en los metamateriales acústicos [4][5][6][7].

En este trabajo, nos enfocamos en calcular la viscosidad efectiva en distintos metamateriales acústicos. Nuestros cálculos se basan en la teoría propuesta por M. Ibarias, et al en 2020 [8], la cual describe de forma exacta las pérdidas en los medios metamateriales debido a las barreras viscosas creadas por las fronteras sólido-fluido.

Presentamos múltiples cálculos para el decaimiento del sonido en distintos sistemas metamateriales binarios sólido-líquido. Para esto, contemplamos distintas secciones transversales sólidas y distintas estructuras cristalinas y además analizamos para que casos se obtiene la máxima viscosidad efectiva en el medio metamaterial. Entre los sistemas analizados está la sección circular, semicircular, cuadrada, rectangular y triangular; además de las estructuras cristalinas cuadrada y hexagonal. Nuestros resultados muestran una fuerte tendencia a un mayor decaimiento del sonido para aquellas estructuras que forman barreras viscosas más estrechas. Esto nos permite poder sintonizar la geometría del metamaterial para obtener la máxima viscosidad efectiva.

Referencias

- [1] Steven A. Cummer, et al. Controlling sound with acoustic metamaterials, *Nature Reviews Materials* 1, 16001 (2016).
- [2] Veselago V. G., The Electrodynamics of Substances with Simultaneously Negative Values of ϵ and μ , *Soviet Physics Uspekhi*, 10, 509, (1964).
- [3] Jensen Li and C.T. Chan, Double-negative acoustic metamaterial, *Physical Review E* 70, 055602, (2004).
- [4] G.P Ward et al., Boundary-layer effects on acoustic transmission through narrow slit cavities en *PRL*, 115, 044302 (2015).
- [5] Miguel Molerón et al., Visco-thermal effects in acoustic metamaterials: from total transmission to total reflection and high absorption, en *New J. Phys*, 18, 033003 (2016).
- [6] Xue Jiang et al., Thermoviscous effects on sound transmission through a metasurface of hybrid resonances, *J. Acoust. Soc. Am.* 141, EL363 (2017).
- [7] José Sánchez-Dehesa et al., Viscothermal losses in double-negative acoustic metamaterials, *Phys. Rev. Appl.* 8, 014029 (2017).
- [8] M. Ibarias, Y. Zubov, J. Arriaga, A.A. Krokhin, Phononic crystal as a homogeneous viscous Metamaterial, *Physical Review Research* 2, 022053 (2020).

Agradecimientos

Se agradece a: CONACYT por el apoyo brindado a través del programa de becas nacionales, en nombre de José Antonio Doporto Ruiz. Así también se agradece al asesor, el Dr. J. Jesús Arriaga como al Dr. Martín Ibarias por la colaboración en esta investigación.

Estudio de capas antirreflejantes de metaestructuras para celdas solares

H. Hernández-Florez^{1*}, C. J. Diliegros-Godines² y F. Pérez-Rodríguez¹

¹Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Instituto de Física, Apdo. Post. J-48, Puebla, Pue. 72570, México

²Tecnológico de Monterrey, Av. Atlixayotl 5718, Reserva Territorial Atlixáyotl, 72453 Puebla, Pue.

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

Palabras clave: Celdas solares, capas antirreflejantes, metaestructuras

Con el fin de trabajar el desarrollo tecnológico de dispositivos fotovoltaicos, o celdas solares, en el presente trabajo se ha estudiado el uso de capas antirreflejantes (CAR) de metaestructuras con arreglo periódico unidimensional basadas en componentes metálico y dieléctrico, aprovechando las excelentes propiedades ópticas sintonizables de este tipo de materiales. Partiendo de la propuesta de una estructura laminar periódica compuesta de bicapas con Si y Ag como componentes, se han realizado el cálculo teórico y el análisis de los espectros ópticos de reflexión y transmisión variando el número de bicapas desde 3 a 15 y también los espesores de cada componente teniendo bicapas desde 30 nm hasta 60 nm. Para esto, se utilizaron diferentes programas basados en los métodos de matriz de transferencia y de expansión en modos de bulto [1]. De los espectros obtenidos se puede observar la importancia de los parámetros que se variaron en el metamaterial laminar para el control de la propagación de la radiación electromagnética, siendo la configuración más relevante de 15 bicapas, cada una compuesta de una capa de 24 nm de Si y una de 12 nm de Ag. Para complementar de manera relevante este análisis, también se calcularon los parámetros efectivos (tensor de permitividad efectivo) de los sistemas propuestos mediante la aproximación de medio efectivo y la teoría de homogeneización no local desarrollada en [1], esto nos permite caracterizar y explicar mejor el comportamiento mencionado del metamaterial y además nos permitirá incorporar la CAR propuesta a un sistema fotovoltaico y así disminuir las pérdidas por reflexión de la celda y mejorar su desempeño. Finalmente, también se comparó el sistema con mejor configuración usando diferentes componentes, siendo los más relevantes TiO_2 y Au.

Referencias

[1] S. Cortés-López, F. Pérez-Rodríguez, Nonlocal effects in nanolayered hyperbolic metamaterials, in: R. Mcphedran, S. Gluzman, V. Mityushev, N. Rylko (Eds.), 2D and Quasi-2D Composite and Nanocomposite Materials: Properties and Photonics Applications, in: Micro and Nano Technologies, Elsevier Inc., 2020, Chap. 7. ISBN: 978-0-12-818819-4.

Agradecimientos

Se agradece a: Instituto de Física y CONACyT.

Estudio óptico y estructural de las películas delgadas de ZnO/Al₂O₃ depositadas por ALD

Frank Romo¹, Jorge A. Montes¹, Godofredo García² y Rafael García Gutiérrez^{1*}

¹Universidad de Sonora, Departamento de Investigación en Física, Blvd. Luis Encinas Y Rosales S/N, Hermosillo, Sonora, C. P. 83000, México

²Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Centro de Inv. en Dispositivos Semiconductores, Puebla, Puebla, C.P. 72570, México

*Autor de correspondencia: rafael.gutierrez@unison.mx

Palabras clave: Nanolaminados, ZnO

El óxido de zinc (ZnO) es un semiconductor de banda ancha directa con una energía de 3.3 eV, tiene una alta energía de enlace de excitones de 60 meV y muestra una conductividad tipo-n a temperatura ambiente. Estas propiedades del ZnO lo convierten en un candidato ideal en el campo de la optoelectrónica [1]. Por otra parte, los materiales nanoestructurados han ido ganando interés en las últimas décadas y actualmente se sintetizan y se estudian nanotubos, nanoalambres, nanobarras y nanolaminados para futuras aplicaciones en dispositivos[2]. En este trabajo se depositaron películas ultra-delgadas de ZnO y nanolaminados de ZnO/Al₂O₃ con espesores menores a los 100 nanómetros por la técnica de Deposito por Capas Atómicas (ALD). En la Figura 1 se exhibe la catodoluminiscencia de nanolaminados de ZnO/Al₂O₃ depositados en esta investigación. Se observa un pico en los 377 nm (3.28 eV) correspondiente a la emisión de banda a banda del material además se observa el efecto de atenuación de la luminiscencia debido a la concentración de las capas de Al₂O₃.

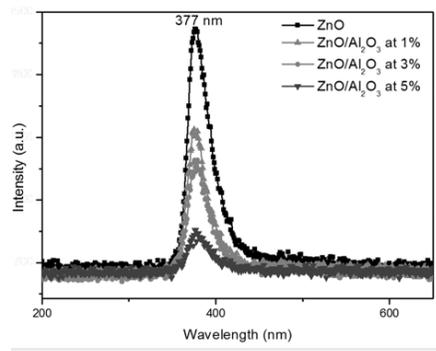


Fig. 1: Espectro de Catodoluminiscencia de las películas de ZnO y ZnO/Al₂O₃ depositadas por ALD.

Referencias

- [1] Ü. Özgür, S. Doğan, H. Morkoç, Journal of Applied Physics, 98, 041301 (2005).
- [2] C. Ye, X. Fang, Y. Hao, L. Zhang, The Journal of Physical Chemistry B, 109, 19758 (2005).

Agradecimientos

Se agradece a la SENER y al CeMIE-Sol por el apoyo brindado a través del proyecto P75 para llevar a cabo esta investigación.

Mejoramiento de la transferencia de calor radiativa de campo cercano mediante películas delgadas superconductoras

S. G. Castillo-López¹, C. Villarreal¹, R. Esquivel-Sirvent¹ y G. Pirruccio^{1*}

¹Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20364, México 01000, México.

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

Palabras clave: Transferencia de calor radiativa de campo cercano, superconductores de alta T_c , películas delgadas.

En el marco de la teoría de la electrodinámica fluctuante de Rytov, presentamos un estudio teórico de la transferencia radiativa de calor de campo cercano entre películas delgadas superconductoras de alta temperatura crítica, T_c . Nos enfocamos en materiales cerámicos como el $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$, óptimamente dopado $\delta = 0.05$, con una $T_c = 93$ K. Demostramos que las películas delgadas mejoran significativamente la transferencia radiativa de calor al acoplar eficientemente los modos ópticos de cada interfaz. La transferencia de calor entre películas delgadas resulta ser hasta un orden de magnitud mayor que entre placas masivas [1], tanto en el estado normal como en el superconductor. Por otra parte, el cambio drástico de la respuesta óptica por encima y por debajo de T_c también juega un papel importante, ya que la transición de fase superconductor conduce a una supresión abrupta del flujo de calor total.

Referencias

[1] S. G. Castillo-López, G. Pirruccio, C. Villarreal y R. Esquivel-Sirvent, Scientific Reports 10, 16066 (2020).

Agradecimientos

S. G. C-L agradece el apoyo del CONACyT-Beca A1-S-10537. R. E-S agradece el apoyo parcial de la DGAPA-UNAM con la beca IN110-819. G. P. agradece el apoyo parcial de la beca DGAPA-PAPIIT IN107319. Todos los autores agradecen el apoyo parcial de la beca IN114920 de la DGAPA-PAPIIT.

Tracking the sputtering deposition of oxygen-free Nb and Si thin films and formation of Nb/Si heterostructure

J.G. Medrano^{1*}, F. J. Flores-Ruiz², V. Garcia-Vazquez¹, F. Pérez-Rodríguez¹

¹Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Post. J-48, Puebla, Pue. 72570, México.

²CONACYT-Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, Puebla 72570, México.

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

Palabras clave: Sputtering, film, deposition, heterostructure

The formation of oxygen-free metal or dielectric thin films with physical deposition technology involves the precise control of growth parameters. To achieve this control, it is necessary not only to follow the pressure of sputtering gas over time but also the evolution of the current and voltage that the sputtering source supplies to the sputtering cathode. These last two parameters are directly associated with the conditions of the plasma sputtering that form the thin film. In this work, we present tracking of current, and voltage provided by the power source and pressure parameters for Nb and Si film deposition. The tracking was conducted from the installation of new targets in the sputtering chamber to the deposit of the individual films. The results of tracking the parameters for Nb-Si heterostructure formation are also presented. The results show that the transition from new to used target changes the current supplied by the source to the sputtering cathode. In addition, it is shown that, even under high vacuum conditions (10^{-7} Torrs), without exposing the target to the environment, pre-sputtering process is necessary to ensure oxygen-free films. These are preliminary results that allow us to understand the thin film growth process for the subsequent formation of reproducible heterostructures.

Efecto de nanopartículas metálicas en la emisión de tierras raras

A. Rivera¹ y O. Meza^{1*}

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

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

Palabras clave: fotoluminiscencia, tierras raras, resonancia plasmónica

El campo electromagnético local mejorado excitado en las nanopartículas metálicas exhibe una aplicación potencial en varias áreas. El acoplamiento resonante de los plasmones de superficie a los centros luminosos puede moderar fuertemente las propiedades de los espectros de emisión, la intensidad, la tasa de decaimiento radiativa e incluso la polarización de la radiación del espectro, o la denominada fluorescencia potenciada por plasmón. Debido a la baja eficiencia de emisión y a la pequeña sección de absorción de iones de tierras raras, la fotoluminiscencia mejorada con plasmón ha atraído una atención creciente recientemente [1]. En este trabajo, estudiamos la dependencia de la emisión de los iones de tierras raras, como donantes y aceptores, con el tamaño y la forma de nanopartículas de oro, se estudiaron nanoesferas con diferentes diámetros de 20 a 100 nm, nanorectángulos con diferentes longitudes en dos de sus ejes de 5 a 20 nm y nanotriángulos con diferentes longitudes de lado de 5 a 20 nm. Para ello, se implementó el modelo de Förster incorporando la herramienta de código libre MNPBEM [2]. De la emisión calculada se desprende claramente que las propiedades ópticas dependen en gran medida del tamaño de las nanopartículas. La emisión máxima de aceptores se da con la nanopartícula de 40 nm y la emisión máxima de donantes es con la nanopartícula de 60 nm. Por otro lado, para las nanopartículas rectangulares aumenta la emisión de los donantes y disminuye la de los aceptores conforme aumenta el tamaño de la nanopartícula, y finalmente para el caso de las nanopartículas triangulares la emisión de los donantes disminuye y la de los aceptores aumenta conforme aumenta el tamaño de la nanopartícula.

Referencias

- [1] J. Donga, W. Gao, Q. Hana, Y. Wanga, J. Qia, X. Yana y M. Sunb, *Reviews in Physics* 4, 100026 (2019).
- [2] U. Hohenester and A. Trügler. *Comp. Phys. Commun.* 183, 370 (2012).

Efecto Goos-Hänchen para modos vibracionales acústicos y ópticos

D. Villegas^{1,2}, J. Arriaga², Z. Lazcano², R. Pérez-Álvarez³ y F. de León-Pérez⁴

¹Departamento de Física, Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas, Cuba

²Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, México

³Centro de Investigaciones en Ciencias, Universidad Autónoma de Morelos, México

⁴Centro Universitario de la Defensa de Zaragoza, España

En este trabajo nosotros generalizamos los resultados obtenidos previamente en las referencias[1,2] al considerar el tunelamiento de varios modos vibracionales acoplados, con polarizaciones longitudinales y transversales, que inciden oblicuamente sobre una estructura semiconductor. En particular, para ángulos de incidencia por encima del ángulo crítico los modos vibracionales acústicos experimentan un desplazamiento lateral análogo al desplazamiento Goos-Hanchen electromagnético. Una selección apropiada de los parámetros de la estructura semiconductor nos permite estudiar el fenómeno de la reflexión total interna frustrada [3] para los modos vibracionales ópticos. Nosotros discutimos la influencia del DGH sobre los tiempos de tunelamiento de los diferentes modos vibracionales. El modelo fenomenológico de onda larga [4] y el método de la matriz global [5] son utilizados para realizar los cálculos numéricos para una estructura fabricada con isótopos del Germanio.

Referencias

- [1] D. Villegas J. Arriaga, F. de León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez: “Goos-Hänchen effect for optical vibrational modes in a semiconductor structure”, J. Phys.: Condens Matter 29, 125301 (2017). [2] L. Fa. et al.: “Acoustic Goos-Hänchen effect”, Sci. China-phys. Mech. Astron. 60, 104311-1 (2017). [3] G. M. Gehring, A. C. Liapis, and R. W. Boyd: “Tunneling delays in frustrated total internal reflection” Phys. Rev. A 85, 032122 (2012). [4] F. de León-Pérez and R. Pérez-Álvarez: “Phonon propagation in nonpolar semiconductor heterostructures”, Phys. Rev. B 63, 245304 (2001). [5] M. J. S. Lowe: “Matrix techniques for modelling ultrasonic waves in multilayered media”, IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectric and Frequency Control 42, 525 (1995).

6 | **Semiconductores**

Desarrollo de Dispositivos Semiconductores para Electrónica Flexible

Miguel A. Dominguez^{1*}, Sonia Ceron¹, Ovier Obregon¹, Salvador Alcantara¹, Susana Soto¹ y Jose L. Sosa¹

¹Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores, Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP), Puebla, 72570, Mexico

*Autor de correspondencia: miguel.dominguezj@correo.buap.mx

Palabras clave: Electrónica Flexible, óxidos semiconductores, semiconductores orgánicos

Recientemente, los sistemas y dispositivos electrónicos fabricados en sustratos flexibles están siendo muy atractivos para la industria y la comunidad científica. Aplicaciones como pantallas enrollables, sensores que se usen sobre la ropa o como parches médicos y circuitería electrónica flexible se encuentran actualmente en desarrollo. Para el desarrollo de esta tecnología emergente, una de las claves radica en la fabricación de dispositivos de efecto de campo como capacitores MIS y transistores de película delgada (TFTs), que serían los elementos básicos de construcción, al igual que los transistores MOS en la tecnología CMOS. En este trabajo, se presenta el desarrollo de dispositivos semiconductores en sustratos flexibles como plástico PET y papel [1, 2].

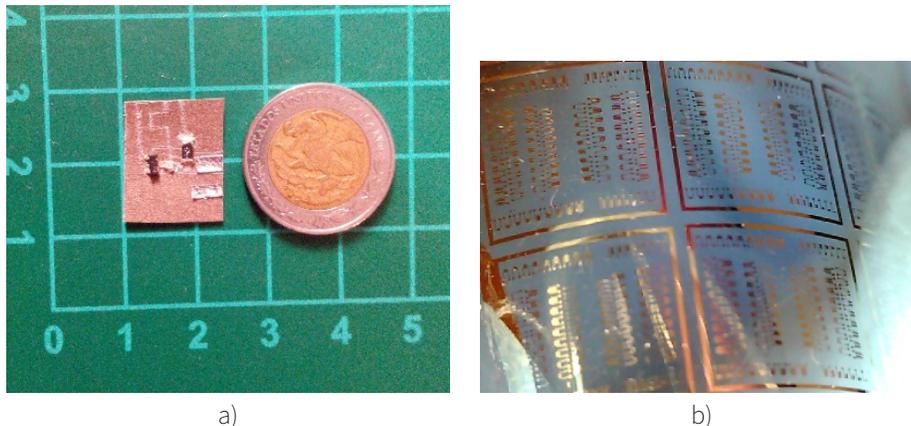


Fig. 1: Dispositivos para Electrónica Flexible. a) Sensor táctil fabricado sobre papel bond, b) Transistores de película delgada sobre plástico PET.

Referencias

- [1] M. Dominguez, J. Sosa. Solid-State Electron 172, 107898 (2020).
- [2] O. Obregón, J. Luna, P. Rosales and M. Domínguez. Revista Mexicana de Física, Aceptado (2021).

Agradecimientos

Trabajo financiado por el Fondo Sectorial de Investigación para la Educación CONACyT-SEP Ciencia Básica [A1-S-7888], VIEP-BUAP [DJMA-EXC17] y Filmtronics Inc., PA, USA.

Modificación de las propiedades físicas de Teluro de Cadmio aplicando rampas de potencia durante el depósito por medio de erosión catódica

E. Rincón¹, E. Rosendo¹, H. Pérez Ladrón de Guevara², R. Romano¹, C. Morales¹, G. García¹, A. Coyopol¹ y R. Galeazzi¹

¹Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Posgrado en Dispositivos Semiconductores, 14 sur y Av. San Claudio, Col. San Manuel, Ciudad Universitaria, Edificio IC6, Puebla, Puebla, México

²Centro Universitario de los Lagos, Universidad de Guadalajara, Av. Enrique Díaz de León 1144, Col. Paseos de la Montaña, Lagos de Moreno, Jalisco 47460, México

*Autor de correspondencia: eliseo.rinconsuarez@alumno.buap.mx

Palabras clave: CdTe, ciclos de potencia, RF sputtering, thin films

El Teluro de Cadmio (CdTe) es un material que tiene muchas aplicaciones en dispositivos semiconductores, es por esto que ha tenido un amplio campo de investigación, el cual, se ve reflejado en la búsqueda de métodos más eficientes para el depósito de películas de CdTe. En este trabajo se estudian los efectos que produce aplicar rampas de potencia de plasma en algunas propiedades físicas de películas delgadas de CdTe por la técnica de erosión catódica [1]. Las rampas de potencia se aplicaron en forma de escalones descendentes desde 30 hasta 40 watts, durante 120, la presión de trabajo de la cámara se mantuvo en 10 mtorr y la temperatura del sustrato fue la temperatura ambiente. Se caracterizaron las muestras mediante espectroscopía Uv-Vis, difracción de rayos X (XRD), espectroscopía Raman, microscopía electrónica de barrido (SEM) y microscopía de fuerza atómica (AFM). En los resultados de XRD se pueden observar picos correspondientes a una dirección de crecimiento preferencial en el plano cristalino (111) (pdf 00-015-0770), con un tamaño de cristal que se encuentra entre 11 y 15 nm obtenido mediante la ecuación de Scherrer. Los espectros Raman por su parte, muestran picos en 140 y 164 cm^{-1} , que corresponden al material depositado según lo reportado [2, 3]. De los espectros de transmitancia UV-vis se calculó mediante la ecuación de Tauc; una energía de banda prohibida de 1.46 eV. La rugosidad se encuentra entre 2 y 9 nm la cual fue medida por AFM tal como se muestra en la Figura 1 donde se puede observar uniformidad en la película depositada, y que es corroborado por las mediciones en el microscopio electrónico de barrido (SEM) donde se puede observar que las películas de CdTe depositadas no muestran defectos en la superficie.

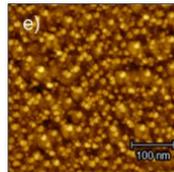


Fig. 1: Imagen AFM de CdTe depositada con una rampa de potencia de plasma descendente.

Referencias

- [1] H. Ashour, F. El Akkad, Phys. Status Solidi (a) 184 (2001) 175.
- [2] Caballero Briones, F.; Zapata Navarro, A.; Martel, A.; Iribarren, A.; Peña, J. L.; Castro Rodríguez, R.; Bartolo Pérez, P.; Rábago Bernal, F. Jiménez Sandoval, S. Compositional mixture in R.F. Sputtered CdTe oxide films. Raman spectroscopy results Superficies y vacío, vol 16. 3, (2003), pp.38-42
- [3] Kulkarni, R., Rondiya, S., Pawbake, A., Waykar, R., Jadhavar, A., Jadkar, V., Jadkar, S. (2017). Structural and Optical Properties of CdTe Thin Films Deposited Using RF Magnetron Sputtering. Energy Procedia, 110, 188-195.

Agradecimientos

Se agradece a: Al Consejo Nacional de Ciencia Y Tecnología por todo el apoyo recibido para desarrollar esta investigación mediante el apoyo de beca No.00187, al Proyecto FOINS - CONACYT #2488, responsable técnico Dr. Francisco Javier Flores Ruiz. Asesoría metodológica en el uso del microscopio de fuerza atómica del IFUAP.

Efecto del tratamiento térmico sobre las propiedades estructurales y eléctricas de películas de AZO depositadas por erosión catódica

A. Carranza¹, E. Rosendo¹, H. Pérez Ladrón de Guevara², C. Morales¹, R. Romano¹, G. García¹, A. Coyopol¹ y R. Galeazzi¹

¹Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Posgrado en Dispositivos Semiconductores, 14 sur y Av. San Claudio, Col. San Manuel, Ciudad Universitaria, Edificio IC6, Puebla, Puebla, México

²Centro Universitario de los Lagos, Universidad de Guadalajara, Av. Enrique Díaz de León 1144, Col. Paseos de la Montaña, Lagos de Moreno, Jalisco 47460, México

*Autor de correspondencia: crystina.carranza@alumno.buap.mx

Palabras clave: rampas de potencia, sputtering

Los óxidos conductores transparentes (TCO) se utilizan para una amplia gama de aplicaciones, como celdas solares, pantallas planas, paneles táctiles y diodos emisores de luz. El ZnO dopado con algunos elementos (Al, In, S, Ga, etc.) ha sido ampliamente utilizado como TCO, debido a que tiene un bandgap de 3.3 eV, alta estabilidad química, bajo costo, fácil obtención y no toxicidad [1,2]. En particular, el ZnO dopado con Al (AZO) en películas delgadas ha atraído más interés debido a su resistividad eléctrica relativamente baja y su alta transmisión óptica [3]. Con la finalidad de mejorar las propiedades del AZO, se obtuvieron películas delgadas mediante la técnica de erosión catódica (sputtering) utilizando rampas de potencia en forma ascendente y descendentes. Se realizó un estudio de las películas de AZO obtenidas a diferentes presiones (5, 8, 10 y 12 mTorr) en función de la temperatura de tratamiento térmico. Las propiedades estructurales se analizaron mediante Difracción de Rayos X y se encontró mayor cristalinidad en las películas con un tratamiento térmico a 200 y 400 °C. Mediante Microscopía de Fuerza Atómica (AFM) se observó que las películas sin tratamiento térmico presentan porosidad y una rugosidad de 3 a 7 nm. El estudio de las propiedades eléctricas mediante Efecto Hall demostró una mejora en la movilidad y menor resistividad de las películas AZO con tratamiento térmico.

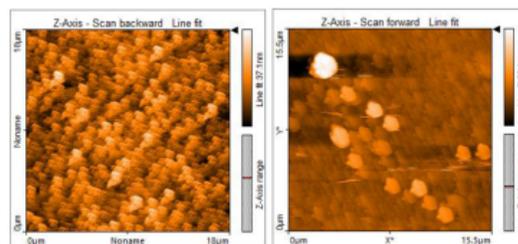


Fig. 1: Imagen AFM aplicando una rampa de potencia en forma de WW a 8 mTorr, a) Sin tratamiento térmico, b) tratamiento térmico a 200° C.

Referencias

- [1] F.H. Wang, J.C. Chao, H.W. Liu, and T.K. Kang, Journal of Nanomaterials, vol. 2015, Article ID 936482, 11 pages, (2015).
- [2] Y. Liu, Y. Li, and H. Zeng, Journal of Nanomaterials, vol. 2013, Article ID 196521, 9 pages, (2013).
- [3] T. Minami, Semiconductor Science and Technology, vol. 20, no. 4, pp. S35-S44, (2005).

Agradecimientos

Se agradece a: la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla por los apoyos otorgados en el uso de los laboratorios e instalaciones y al CONACYT por la beca otorgada para la realización de este proyecto.

7 | **Sistemas amorfos**

Characterization of the water transport in concretes mixed with pozzolanic residues of bamboo (bamboo leaf ash): kinetic parameters

Ernesto Villar-Cociña*, Jesús Hernández-Ruiz y Raikol Ortega

Central University "Marta Abreu" de Las Villas Highway to Camajuaní Km 5.5, Santa Clara, Villaclara Cuba

*Autor de correspondencia: evillar@uclv.edu.cu

Palabras clave: Concrete, bamboo leaf ash, pozzolan, capillary-diffusive model, kinetic

The water transport process in concretes is responsible for the deterioration of concretes and their reinforcement structures, causing a considerable decrease in their performance in countries with a maritime climate such as Cuba. It is known that pozzolanic additions in their reaction with calcium hydroxide (produced in the cement and concrete hydration) act as waterproofing of concrete. In this research work a quantitative characterization of the water absorption process in concretes added with Cuban bamboo leaves ash (in proportions of 10, 15 and 20 % of ash and the control sample of concrete (0 % ash) is carried out. A capillary-diffusive model (published by the authors in previous works) is used to describe the water absorption process. The kinetic parameters that characterize the process (in particular, the sorptivity coefficient and diffusion coefficient) are determined with relative accuracy in the fitting process of the model. The water absorption process in concrete added with bamboo leaf ash is quantitatively evaluated according to the results obtained for the kinetic parameters. This allows the comparison in a direct way of the water sorption process of the materials, which is very useful for the employment of these materials for constructions in maritime environment. According to the values calculated of the sorptivity coefficient S , for concretes elaborated with OPC and BLAsh, the OPC + BLAsh 15 % shows the lower sorptivity coefficient S ($1.66 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^2\text{s}^{1/2}$) followed by OPC + BLAsh 20 % ($1.93 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^2\text{s}^{1/2}$), OPC + BLAsh 10 % ($2.88 \times 10^{-3} \text{ kg/m}^2\text{s}^{1/2}$) and OPC + % ($1.73 \times 10^{-2} \text{ kg/m}^2\text{s}^{1/2}$). The concrete formed from a mixture of 15 % of BLAsh and OPC was the one that presented the lowest absorption coefficient i.e.greater impermeability and therefore greater durability.

Referencias

- [1] Adesanya, D. A. and Raheem, A. A. (2010) 'A study of the permeability and acid attack of corncob ash blended cements', *Constr Build Mater*, 24.
- [2] Adrian Licor Cebey (2016) Evaluación de la carbonatación en hormigones elaborados con cemento de bajo carbono LC 3.
- [3] Ahmadi, B. and Shekarchi, M. (2010) 'Cement & Concrete Composites Use of natural zeolite as a supplementary cementitious material', *Cement and Concrete Composites*. Elsevier Ltd, 32(2), pp. 134–141. doi: 10.1016/j.cemconcomp.2009.10.006.
- [4] Aprianti, E. et al. (2015) 'Supplementary cementitious materials origin from agricultural wastes—a review', *Constr. Build. Mater*, 74, pp. 176–187.
- [5] Autié Perez, M. (1999) Las zeolitas naturales cubanas como adsorbentes y separadores de vapores y gases.
- [6] Bas, O. I. M. (2008) La influencia de las cenizas volantes como sustituto parcial del cemento Portland en la durabilidad del hormigón. UNIVERSIDAD POLITÉCNICA DE MADRID ESCUELA.
- [7] Chandrasekhar, S. et al. (2003) 'Processing, properties and applications of reactive silica from rice husk—an overview', *Journal of Materials Science*, 38.
- [8] Cociña, E. V., Rodier, L. and Lefran, M. (2018) 'Pozzolanic Characterization of Cuban Bamboo Leaf Ash: Calcining Temperature and Kinetic Parameters', *Waste and Biomass Valorization*. Springer Netherlands, 9(4), pp. 691–699. doi: 10.1007/s12649-016-9741-8.
- [9] Cociña, V., Frías, M. and Talero, R. (2011) 'Adiciones activas al cemento: Inventario, caracterización y propiedades. Aprovechamiento de residuos agroindustriales como fuente sostenible de materiales de construcción', *Cement & Concrete Composites*, 30, pp. 50–57.
- [10] Cruz, N. C. P. (2015) Transporte de agua en hormigón mezclado con residuos puzolánicos. Determinación de los parámetros cinéticos del proceso. Tesis de Bachelor en Física
- [11] Villar-Cociña E, Valencia-Morale E, J. V.-L. (2005) 'Kinetics of the water absorption in GGBS-concretes : A capillary-diffusive model', *Computers and Concrete*, 2(1), pp. 19–30
- [12] Villar-Cociña, Ernesto; Savastano, Holmer, Rodier, Loïc ; Lefran, Manuel ; Frías, Moisés (2018). Pozzolanic Characterization of Cuban Bamboo Leaf Ash: Calcining Temperature and Kinetic Parameters. *Waste and Biomass Valorization* 9: 691-699.

[13] A Comparative Study on the Pozzolanic Activity between Bamboo Leaves Ash and Silica Fume: Kinetic Parameters, Villar-Cociña E, Rodier L, Savastano H, Lefran M, Frías M (2020). Waste and Biomass Valorization, 11:1627–1634.

Agradecimientos

The authors thank to Constructions Faculty, Central University of Las Villas by the experimental support The authors thank also to CNPq (Process No. 313782 / 2013-0, Project PVE), CNPq (ref: 306386 / 2013-5) .FAPESP (Process No. 2018 / 10719-6) for its financial Support.

Difusión de humedad en sólidos con geometrías planas y esféricas: Casos de coeficientes de difusión constante y dependiente de la concentración

David Rodríguez Fernández, Jesús E. Hernández Ruiz* y Williams Morales González

Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Dpto. de Física, Carretera a Camajuaní km 5 y ½. Sta. Clara 54 830. Villa Clara. Cuba

*Autor de correspondencia: jesusehr@uclv.edu.cu

Palabras clave: Difusión de humedad, Método de líneas

Se describe la cinética de difusión de humedad en sólidos con geometrías planas y esféricas en los casos en que la difusión transcurre a ritmo constante y cuando coeficiente de difusión depende de la concentración. En ambos casos, la modelación del problema correspondiente de absorción-desorción de humedad se efectuó empleando la Teoría Clásica de la Difusión y un método de diferencias finitas, a saber: el Método de Líneas. Empleando este método y el software Wolfram Mathematica 11.0 se encontró la solución numérica del problema de difusión de humedad en geometrías planas y esféricas para los casos de coeficiente de difusión constante y dependiente de la concentración de la sustancia difusora. En el segundo caso, se analizaron varios tipos de dependencia del coeficiente de difusión con la concentración. Se simuló las curvas de absorción y desorción de humedad, según el comportamiento del coeficiente de difusión, ya sea constante o dependiente de la concentración. El resultado fundamental es un procedimiento numérico que permite describir teóricamente la cinética de difusión de la humedad en sólidos con geometrías planas y esféricas, tanto para cuando el coeficiente de difusión es constante, como para cuando varía con la concentración.

8 | Superconductividad

Algo sobre estados electrodinámicos no estacionarios en superconductores tipo II

O. A. Hernández-Flores^{1*}, C. E. Ávila-Crisóstomo¹, J. Gutiérrez-Gutiérrez¹, C. Romero-Salazar¹, R. Cortes-Maldonado²

¹Universidad Autónoma Benito Juárez de Oaxaca, Escuela de Sistemas Biológicos e Innovación Tecnológica, Av. Universidad s/n Ex-Hacienda Cinco Señores, C.P. 68120, Oaxaca de Juárez, Oax, México

²Tecnológico Nacional de México, IT de Apizaco, Ave. Instituto Tecnológico s/n, C.P. 90300, Apizaco, Tlaxcala, México

*Autor de correspondencia: ohernandez.ciencias@uabjo.mx

Palabras clave: estados electrodinámicos no estacionarios, estado crítico

Para obtener las propiedades electromagnéticas macroscópicas de superconductores tipo II, las aproximaciones de electrodinámica de continuo son empleadas con frecuencia, principalmente para el diseño ingenieril de nuevas tecnologías. La respuesta electromagnética del material superconductor es por la circulación de una corriente de transporte, o bien, por la aplicación de un campo magnético, o ambos. El campo eléctrico también perturba al material, pero en general, la respuesta no es apreciable. En particular, es de nuestro interés la respuesta magnética de un superconductor producida por la presencia de un campo magnético externo de corriente directa que varía en el tiempo. Existe una amplia cantidad de literatura científica que abordan el tema, y es que la presencia del campo magnético pone de manifiesto múltiples y fascinantes fenómenos físicos tales como la expulsión de Meissner, el estado mixto, avalanchas de vórtices, flux creep y flow, magnetizaciones espectaculares, corte de líneas de flujo, etc. Dentro de la descripción electrodinámica de continuo para superconductores tipo II en fase de Shubnikov o estado mixto [1] mostramos que se requieren expresiones consistentes de la resistividad y la densidad de corriente crítica para asegurar una descripción dinámica adecuada.

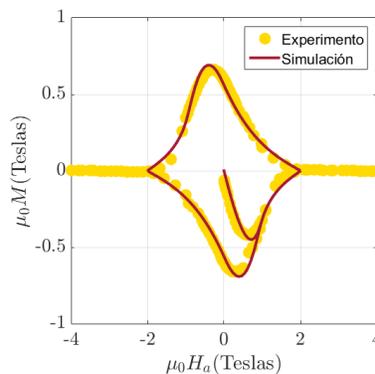


Fig. 1: Curvas de magnetización experimental (bolas amarillas) [2] y teórica (línea roja) cuidando la consistencia entre la resistividad y el estado crítico.

Referencias

[1] E. H. Brandt, Phys. Rev. B 60, 11939-11942 (1999)

[2] C. Romero-Salazar, F. Morales, R. Escudero, A. Duran, O. A. Hernández- Flores, Phys. Rev. B 76 104521 (2007).

EFFECTO DEL NEODIMIO EN LAS PROPIEDADES DE LA DOBLE PEROVSKITA $Sr_{2-y}Nd_yFe_{1+x}Mo_{1-x}O_6$ (PARA y EN EL RANGO $0 - 0.4$)

T. E. Soto^{1,a}, Bertha O. Aguilar R¹, O. Navarro¹

¹Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM, Antigua carretera a Pátzcuaro 8701 Ex-hacienda de San José de la Huerta C.P. 58190, Morelia Mich.

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

Los óxidos medio metálicos, con estructura de doble perovskita son compuestos con gran potencial de aplicación en espintrónica. Esto se atribuye a las propiedades particulares del sistema Sr_2FeMoO_6 (SFMO), las cuales han sido ampliamente estudiadas, entre ellas la polarización de spin, la magnetorresistencia a bajo campo y su alta temperatura de Curie (T_C). Esta última es susceptible de ser modificada con el aumento de electrones itinerantes en el nivel de Fermi, para ello, los elementos lantánidos son excelentes opciones por tener 3 electrones en su capa de valencia. En el presente trabajo se realiza la síntesis del mencionado sistema dopado con Neodimio, considerando por un lado, el dopaje estequiométrico, es decir ajustando la cantidad de Fe y Mo de modo que se mantenga la neutralidad de la carga en el compuesto: $Sr_{(2-y)}Nd_yFe_{(1+x)}Mo_{(1-x)}O_6$ (donde $x = y/2$). Por otro lado, se sintetizó también el sistema no estequiométrico, en el que no se varía la cantidad de Fe y Mo: $Sr_{(2-y)}Nd_yFeMoO_6$. Para el sistema estequiométrico se ha reportado una transición magnética para un valor alrededor de $y = 0.25$, por lo que el presente estudio se centra en el rango de bajo dopaje ($y < 0.4$). Se presentan los resultados preliminares de la caracterización química y magnética [1].

Referencias

- [1] Effects of neodymium doping on the structural and magnetic properties of the double perovskite $Sr_{2-y}Nd_yFe_{1+x}Mo_{1-x}O_6$ compound. Y. Ruiz, B. Aguilar, C. Carvallo, J. de la Torre Medina and O. Navarro. International Journal of Modern Physics B. Vol. 33 (2019).
- [2] Curie temperature enhancement in the double perovskite $Sr_{2-x}La_xFeMoO_6$ system: An experimental study. B. Aguilar, T.E. Soto, J. de la Torre Medina and O. Navarro. Physica B: Condensed Matter 556 (2019).

Agradecimientos

Se agradece a: Proyecto PAPIIT IN-105019 y al CONACyT por su contribución en el desarrollo de este proyecto.

Dependencia en la temperatura del factor de corrección de van der Pauw

Polito-Lucas, J.A.^{1*}, González-Ronquillo, A.L.¹, García-Vázquez, V.¹

¹Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48, Puebla, Pue. 72570, México

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

Palabras clave: factor de corrección, van der Pauw, resistividad.

Se presenta la técnica de van der Pauw (VDP) para determinar la resistividad eléctrica en películas delgadas como función de la temperatura. El modelo convencional de VDP requiere de un factor de corrección para compensar la no homogeneidad de una película, la cual puede deberse a diferentes factores, por ejemplo, la rugosidad. En este trabajo, se presentan los valores calculados del factor de corrección a varias temperaturas obtenidos a partir de mediciones precisas de resistencia eléctrica, desde 15 hasta 290 K, en películas delgadas de Niobio y una muestra cerámica de $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$. Películas delgadas de Nb de 100 nm de espesor fueron preparadas mediante la técnica de magnetrón sputtering DC variando la presión de plasma durante el depósito [1,2].

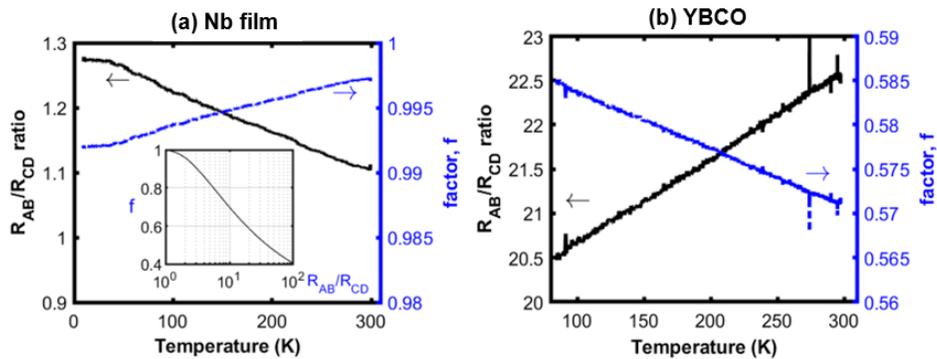


Fig. 1: Relación de R_A/R_B y el factor de van der Pauw como función de la temperatura de (a) película delgada de Nb y (b) muestra cerámica de YBCO.

Referencias

- [1] L.J. van der Pauw, Phillips Technical Review 20 (8), 220-224 (1958).
 [2] Polito-Lucas, J.A., Estudio de resistividad en películas delgadas de Nb mediante el método de van der Pauw a bajas temperaturas, (Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 2019).

Agradecimientos

Se agradece al proyecto FOINTS CONCACYT #2488.

Simulación numérica del efecto del apantallamiento magnético y del corte de líneas flujo en una muestra superconductora de Pbln

Raúl Cortés Maldonado¹, Omar Augusto Hernández Flores² y Carolina Romero Salazar^{2*}

¹Tecnológico Nacional de México, IT de Apizaco, Departamento de Eléctrica-Electrónica, Ave. Instituto Tecnológico s/n, Apizaco, Tlaxcala, México

²Universidad Autónoma Benito Juárez de Oaxaca, Escuela de Sistemas Biológicos e Innovación Tecnológica, Av. Universidad s/n, Oaxaca de Juárez, Oaxaca México

*Autor de correspondencia: cromero.cat@uabjo.mx

Palabras clave: primer campo crítico finito, corte de líneas de flujo

Se presenta una extensión del modelo elíptico que considera estados más allá del estado crítico para describir la magneto-dinámica no estacionaria de un superconductor tipo II sometido a un campo magnético externo de baja frecuencia. Se estudió el caso de una muestra superconductora que rota y que, por lo tanto, además de la densidad de corriente perpendicular al campo magnético (H) (J_{\perp}), se genera una componente de J paralela a H (J_{\parallel}). El modelo extendido se implementó para explicar experimentos de un disco de Pbln que gira en presencia de un campo magnético H_a de dirección fija. Se analizó el efecto del apantallamiento de Meissner en la respuesta magnética de una placa superconductora con fuerza de enclavamiento débil (weak pinning). El estudio considera una inducción magnética no estacionaria y considera un primer campo crítico H_{c1} finito, condición que implica la aparición de regiones libres de flujo en el régimen $H < H_{c1}$. Con la propuesta teórica analizamos cómo puede afectar el entrelazamiento de vórtices a la magnetización de la muestra, ya que conforme rota la muestra se promueve una configuración libre de fuerzas y el diamagnetismo de la muestra se intensifica [1-3].

Referencias

- [1] E.H. Brandt Phys. Rev. B 59, 3369 (1999). DOI 10.1103/PhysRevB.59.3369. URL <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.59.3369>
- [2] V. Vlasko-Vlasov, A. Koshelev, A. Glatz, C. Phillips, U. Welp, W. Kwok, Phys. Rev. B 91, 014516 (2015). DOI 10.1103/PhysRevB.91.014516.
- [3] Sekerka, J.: Flux cutting in semi-reversible and irreversible type II superconductors. Master's thesis, University of Ottawa (1989)

Agradecimientos

Este trabajo fue parcialmente apoyado por SEP-CONACYT (México) a través del proyecto CB-2012-01-183673

9 | Spintrónica

Vórtices de corriente en moléculas aromáticas de carbono

Thomas Stegmann

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

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

Palabras clave: nano-estructuras de carbono, transporte electrónico, vórtices de corriente

Se estudia el flujo de corriente local a través de tres pequeñas moléculas aromáticas de carbono, benceno, naftaleno y antraceno. Aplicando la teoría del funcional de la densidad (DFT) y el método de transporte de la función de Green (NEGF), demostramos que existen vórtices de corriente pronunciados a ciertas energías electrónicas. La intensidad de estas corrientes circulares, que aparecen no solo en las anti-resonancias de la transmisión sino también en las proximidades de sus máximos, pueden superar la corriente total que fluye a través de la unión molecular y generar considerables campos magnéticos. El sistema de electrones π de las uniones moleculares se emula experimentalmente mediante una red de resonadores de microondas macroscópicos. Los flujos de corriente en estos experimentos confirman la existencia de vórtices de corriente como una propiedad robusta de las estructuras de anillo. Las corrientes circulares pueden entenderse en términos de un modelo de Hückel. Ellos son causados por la interacción de los complejos eigen-estados del sistema abierto que tienen energías cercanas a la energía de los electrones.

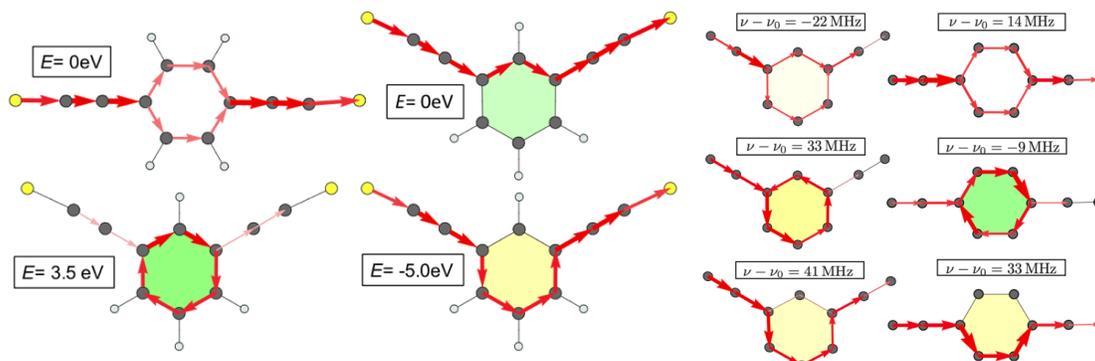


Fig. 1: Corriente en benceno, calculada (izquierda) y emulada por experimentos con resonadores de microondas (derecha).

Referencias

TS, J.A. Franco-Villafañe, Y.P. Ortiz, M. Deffner, C. Herrmann, U. Kuhl, F. Mortessagne, F. Leyvraz, T.H. Seligman, Phys. Rev. B 102, 075405 (2020).

Agradecimientos

Se agradece el financiamiento a los proyectos CONACYT A1-S-13469 y UNAM-PAPIIT IA103020.

Nanoresonadores como polarizadores de valle

Walter Ortiz¹ y Thomas Stegmann²

¹Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, México

²Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, México

*Autor de correspondencia: walter20@gmail.com

Palabras clave: transporte electrónico en grafeno, polarizador para espín de valle

Se estudia el flujo de corriente en nanoresonadores de grafeno (Fig.1). La nanocinta de grafeno, deformada en el orificio del resonador, se modela por un Hamiltoniano tipo tight-binding y el transporte se estudia utilizando funciones de Green fuera del equilibrio. Se incluyeron en el estudio dos tipos de deformaciones, plana y circular. En ambos casos se utilizaron varios modos de resonancia que generan distintos patrones de deformación. Se observa que el haz de electrones que se inyecta se separa y es desviado o enfocado de acuerdo con la polarización de valle de los electrones (Fig. 2). Las deformaciones causan un campo pseudomagnético que explica la polarización de los haces de electrones en su espín de valle, lo que muestra que los nanoresonadores pueden ser usados como un polarizador para el spin de valle. Diferentes patrones del campo pseudomagnético pueden ser usados para obtener un haz de electrones polarizado en el valle K o el valle K'.

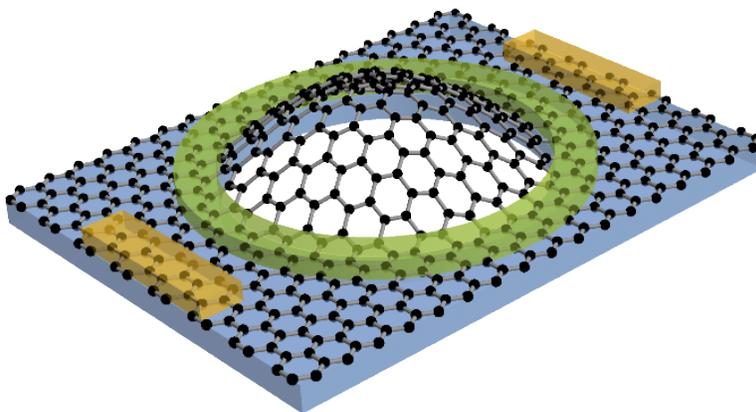


Fig. 1: Nanoresonador con un orificio circular.

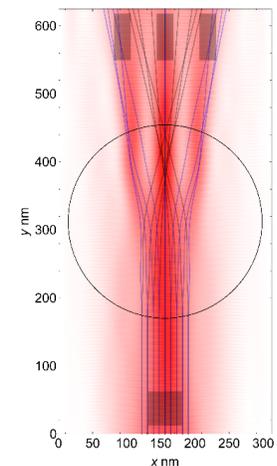


Fig. 2: Densidad de corriente.

Referencias

TS, J.A. Franco-Villafañe, Y.P. Ortiz, M. Deffner, C. Herrmann, U. Kuhl, F. Mortessagne, F. Leyvraz, T.H. Seligman, Phys. Rev. B 102, 075405 (2020).

Agradecimientos

Se agradece el financiamiento a los proyectos CONACYT A1-S-13469 y UNAM-PAPIIT IA103020.

10 | Aislantes topológicos

Bombeo topológico de alto orden en una red de Sierpinsky

Marco Antonio Diaz Villarreal^{1*}, José Eduardo Barrios Vargas²

¹Facultad de ciencias, UNAM, Física, Av Universidad 3000, Ciudad Universitaria, CDMX, México

²Facultad de Química, UNAM, Física y Química Teórica, Av Universidad 3000, Ciudad Universitaria, CDMX, México

*Autor de correspondencia: toodivz@ciencias.unam.mx

Palabras clave: Aislantes Topológicos, Bombeo, Fractales

Un material que presenta una fase topológica se caracteriza por tener estados electrónicos de borde robustos a impurezas y fluctuaciones térmicas. Usualmente dichos estados se restringen espacialmente a la frontera del material. Recientemente, Benalcazar et al. extendieron la clasificación de las fases topológicas donde los estados topológicos pueden restringirse a bordes de menor dimensión [1, 2]. Estas fases topológicas pueden exhibir características como polarización cuantizada y transporte cuantizado [3, 4]. Actualmente se han logrado observar estos estados en arreglos fonónicos, circuitos eléctricos y cristales fotónicos [5,6]. En este trabajo, presentamos un modelo de aislante multipolo eléctrico cuantizado sobre una red fractal (alfombra Sierpinski). Así mismo, estudiamos las propiedades de transporte a través de bombeo adiabático en un ciclo periódico, este bombeo está relacionado con la conexión adiabática de la transición entre los estados topológicos y triviales en el material.

Referencias

- [1] W. A. Benalcazar, et al. Science 357, 6346, pp. 61-66 (2017)
- [2] W. A. Benalcazar, et al. Phys. Rev. B 96, 245115 (2017)
- [3] F. Schindler et al. Science Advances, 4, 6, eaat0346 (2018)
- [4] W. A. Benalcazar, et al. arXiv:2006.13242 (2020)
- [5] Serra-Garcia, Marc, et al. Nature 555.7696 (2018): 342.
- [6] Peterson, Christopher W., et al. "Nature 555.7696 (2018): 346.

Fases geométricas y entrelazamiento cuántico en el modelo 1D Su-Schrieffer-Hegger

Leonardo A. Navarro-Labastida y F. Rojas

Centro de Nanociencias y Nanotecnología, Departamento Física Teórica, Apdo. Postal 22800 Sauzal, Ensenada, México.

*Autor de correspondencia: leonardo.navarro@cny.n.unam.mx

Palabras clave: Aislante topológico, entrelazamiento cuántico

Los materiales topológicos se encuentran adicionalmente protegidos por la propiedad de robustez que otorga la presencia de fases no triviales en su estructura de bandas, tal es el caso de los aislantes topológicos. El modelo más simple y no trivial es probablemente el modelo Su-Schrieffer-Heeger (SSH) [1], el cual es un modelo de amarre fuerte y cuya variación paramétrica de los hoppings permite modular la aparición de los estados bordes y su topología. Actualmente, se están buscando materiales robustos contra decoherencias para aplicaciones tecnológicas, una de las mayores causas es la creación de una computadora cuántica. Sin embargo, dado a las fluctuaciones cuánticas los estados cuánticos fácilmente son destruidos, por lo tanto, una alternativa es la implementación de estos materiales exóticos que brinden su robustez topológica en la protección y procesamiento de la información cuántica. Tal vez, el indicio más importante de que los materiales topológicos son buenos candidatos en el procesamiento y manejo de la información es la presencia de un alto grado de entrelazamiento [2] de los subsistemas presentes. En este trabajo, presentamos resultados que clarifican la ventaja de la implementación de aislantes topológicos contra aislantes convencionales en cuestiones de información cuántica, su alcance y futuros retos.

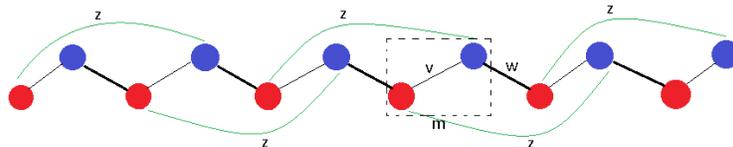


Fig. 1: Modelo SSH 1D extendido o alambre topológico con interacción a segundos vecinos.

Referencias

- [1] Li, C., & Miroshnichenko, A. (2018). Extended SSH Model: Non-Local Couplings and Non-Monotonous Edge States. *Physics*, 1(1), 2–16. <https://doi.org/10.3390/physics1010002>
- [2] Bogdanov, A. Y., Bogdanov, Y. I., & Valiev, K. A. (2007). Schmidt information and entanglement of quantum systems. *Moscow University Computational Mathematics and Cybernetics*, 31(1), 33–42. <https://doi.org/10.3103/S0278641907010074>

Agradecimientos

Se agradece a Conacyt por su apoyo mediante una beca nivel maestría para el desarrollo del trabajo de investigación.

Índice alfabético de autores

A		F		Martínez Mondragon, M. 32	
Aguilar, B. O.	26, 65	Ferreira, E.	41	Martínez-Angeles, W. L.	11, 30
Aguilar-Mendez, Enrique	13	Flores-Ruiz, F. J.	51	Medrano, J.G.	51
Alcantara, Salvador	56	G		Meza, O.	52
Amador-Alvarado, S.	46	Gaggero-Sager, L. M.	19, 20	Miranda, Álvaro	6, 8, 14, 24, 27, 28, 33, 36
Amador-Bedolla, Carlos	3	Galeazzi, R.	57, 58	Mireles, Francisco	15
Arciniega-Gutiérrez, Armando Q.	18	García, Kevin J.	33	Molina-Valdovinos, S.	7
Arellano, Lucia G.	6, 28	García-Vazquez, V.	51	Montano González, Gerardo A.	16
Arenas Alatorre, J. A.	32	García Gutiérrez, Rafael	49	Montes, Jorge A.	49
Ariza-Flores, D.	46	García, G.	57, 58	Morales González, Williams	62
Arriaga, J.	47, 53	García, Godofredo	49	Morales, C.	57, 58
Arzola Flores, Jesús Andrés	37, 38	García-Ramírez, M. A.	11, 30	N	
B		García-Vázquez, V.	66	Nakamura, Jun	6, 28
Banda, J.A.M.	34	González, Israel	27	Naumis, Gerardo G.	13
Barreto Rentería, J.	32	González-Reynoso, O.	11, 30	Navarro, O.	10, 26, 65
Barrios-Vargas, José Eduardo	9, 44, 74	González-Ronquillo, A. L.	37, 38, 45, 66	Navarro-Espino, M.	9
Bello-Jiménez, M. A.	30	Granados, F. G.	26	Navarro-Labastida, Leonardo A.	13, 75
Betancur Ocampo, Yonatan	12, 17	Guerrero-Sanchez, Jonathan	40	O	
Briones-Torres, J. A.	7	Gutiérrez-Gutiérrez, J.	64	Obregon, Ovier	56
C		Guzmán-Chávez, A.D.	30	Olea-Amezcuca, M. A.	41
Calvino, Marbella	14	H		Olivares-Xometl, O.	41
Canto, G.	31	Henandez Reyes, Roberto	32	Ortega, Raikol	60
Carbajal-Arizaga, G. G.	11	Hernández Ruiz, Jesús E.	60, 62	Ortiz, Walter	71
Carranza, A.	58	Hernández-Cocoletzi, H.	41	P	
Castellanos-Aguila, J. E.	41	Hernández-Flores, O. A.	64, 67	Paredes Rocha, Emmanuel	12, 17
Castillo-López, S. G.	50	Hernández-Florez, H.	48	Pirruccio, G.	50
Ceron, Sonia	56	Huipe-Domratcheva, E.	10	Polito-Lucas, J. A.	66
Chávez Segura, J.P.A.	35	I		Pérez Ladrón de Guevara, H.	57, 58
Cocoletzi, Gregorio H.	31	Ibarias, M.	47	Pérez, Luis A.	6, 8, 14, 24, 28, 34
Contreras Solorio, David Armando	16	Iturrios, M. I.	24, 33, 36	Pérez-Díaz, Samantha	21
Corbett, Joseph P.	40	J		Pérez-Huerta, J. S.	46
Cortez-Valadez, M.	29	Jhoseph Cid, Brandom	8	Pérez-Rodríguez, F.	2, 21, 48, 51
Cortés Maldonado, Raúl	64, 67	K		Pérez-Álvarez, R.	7
Coyopol, A.	57, 58	Konovalenko, A.	2	Q	
Crissotomo, M.	34	L		Quiroga-González, Enrique	21
Crisóstomo, Margarita C.	14, 33	Lazcano, Z.	53	R	
Cruz-Irisson, Miguel	6, 8, 14, 24, 27, 28, 34-36	Leal, Tania	36	R. Pérez-Álvarez, R.	53
D		León-Flores, J.	32	Rebollo, J.	35
de León-Pérez, F.	53	Likhanova, Natalya V.	41	Rincón, E.	57
de Santiago, Francisco	6, 24	López-Vázquez, L. F.	29	Rivera, A.	52
Díaz Villarreal, Marco Antonio	74	M		Rodríguez Fernández, David	62
Dilliegros-Godines, C. J.	48	Madrigal-Melchor, J.	46	Rodríguez-González, R.	19, 20
Dominguez, Miguel A.	56	Makarov, N.M.	2	Rodríguez-Vargas, I.	7, 19, 20
Doporto, J.	47	Mandru, Andrada-Oana	40	Rojas, F.	75
E		Marcos-Viquez, Alma L.	14	Romano, R.	57, 58
Enciso Muñoz, Agustín	16	Martínez Mondragon, M. 32		Romero-Salazar, C.	64, 67
Esquivel-Sirvent, R.	50	Martínez-Angeles, W. L. 11, 30			
		Flores-Ruiz, F. J. 51			
		Meza, O. 52			
		Miranda, Álvaro 6, 8, 14, 24, 27, 28, 33, 36			
		Mireles, Francisco 15			
		Molina-Valdovinos, S. 7			
		Montano González, Gerardo A. 16			
		Montes, Jorge A. 49			
		Morales González, Williams 62			
		Morales, C. 57, 58			
		Nakamura, Jun 6, 28			
		Naumis, Gerardo G. 13			
		Navarro, O. 10, 26, 65			
		Navarro-Espino, M. 9			
		Navarro-Labastida, Leonardo A. 13, 75			
		Obregon, Ovier 56			
		Olea-Amezcuca, M. A. 41			
		Olivares-Xometl, O. 41			
		Ortega, Raikol 60			
		Ortiz, Walter 71			
		Paredes Rocha, Emmanuel 12, 17			
		Pirruccio, G. 50			
		Polito-Lucas, J. A. 66			
		Pérez Ladrón de Guevara, H. 57, 58			
		Pérez, Luis A. 6, 8, 14, 24, 28, 34			
		Pérez-Díaz, Samantha 21			
		Pérez-Huerta, J. S. 46			
		Pérez-Rodríguez, F. 2, 21, 48, 51			
		Pérez-Álvarez, R. 7			
		Quiroga-González, Enrique 21			
		R. Pérez-Álvarez, R. 53			
		Rebollo, J. 35			
		Rincón, E. 57			
		Rivera, A. 52			
		Rodríguez Fernández, David 62			
		Rodríguez-González, R. 19, 20			
		Rodríguez-Vargas, I. 7, 19, 20			
		Rojas, F. 75			
		Romano, R. 57, 58			
		Romero-Salazar, C. 64, 67			

División de Estado Sólido, SMF 2021

Romo, Frank	49	Soto, T. E.	65	Trejo-Durán, M.	41
Rosendo, E.	57, 58	Springborg, Michael	31		
Ruvalcaba, Ricardo	40	Stegmann, Thomas	12, 17, 18, 70, 71		
Ruiz-Tijerina, David A.	15	Sustaita Torres, I. A.	46	V	
		Szpak, Nikodem	17	Vargas-Rodríguez, E.	30
S		Sánchez, Fernando	3	Velázquez-López, E. C.	44
Salazar, Fernando	8, 27, 28, 34–36	Sánchez, Vicenta	3	Villar-Cociña, Ernesto	60
Santana, José Eduardo	24, 33	Sánchez-Arellano, A.	46	Villarreal, C.	50
Santos-Gomez, Arturo	45	Sánchez-Ochoa, Francisco	31	Villegas, D.	53
Smith, Arthur R.	40				
Soltero, Isaac	15	T			
Sosa, Akari Narayama	27	Takeuchi, Noboru	40		
Sosa, Akari Nayarama	8	Tehuacanero, S.	32	W	
Sosa, Jose L.	56	Torres Rojas, Raúl Mauricio	16	Wang, Chumin	3
Soto, Susana	56	Trejo-Baños, Alejandro	27, 28, 33, 35	Ávila-Crisóstomo, C. E.	64