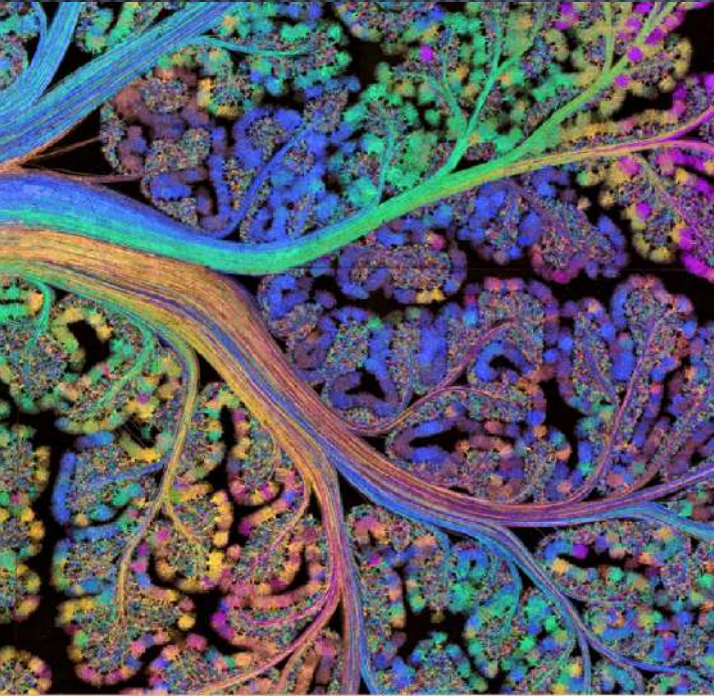




**BUAP**

IFUAP - CIDS - FCFM



*¿Fractales en la naturaleza?*

## DIRECTORIO

### Rector

Dr. Alfonso Esparza Ortíz

### Director del Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas” (IFUAP)

Dra. María Eugenia Mendoza Álvarez

### Director del Instituto de Ciencias (ICUAP)

Dr. Jesús Francisco López Olguín

### Director de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas (FCFM)

Dra. Martha Alicia Palomino Ovando

## COMITÉ EDITORIAL

M.C. Diana del Carmen Rojas Ciofalo  
drojas@ifuap.buap.mx

M.C. Erick Leonel Espinosa Villatoro  
erickev@ifuap.buap.mx

Dr. José Roberto Nicolás Carlock  
jnicolas@ifuap.buap.mx

M.C. Fernando Enrique Loranca Ramos  
floranca@ifuap.buap.mx

M.C. Juan Antonio Castillo Cervantes  
jacastillo@tlaloclabs.com

M.C. Alexander J.C. Juárez Domínguez  
ajuarez@ifuap.buap.mx

## AGRADECIMIENTOS

La impresión de este tercer número ha sido posible gracias al apoyo de:

**IFUAP – ICUAP/CIDS – FCFM**

**Programa de  
Fortalecimiento de Calidad  
Educativa (PFCE-2018) SEP**

## EDITORIAL

Con esta nueva edición de *Con-ciencia* retomamos este importante proyecto de comunicación de la ciencia, que tiene como principal objetivo el promover la cultura de la divulgación y del periodismo científico entre la comunidad estudiantil de nuestra Universidad, la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP).

Con la actual tendencia mundial hacia las multidisciplinas, es nuestro deseo que este proyecto aporte a la generación y coalescencia de ideas para que se compartan entre las distintas comunidades de nuestra universidad, así como a su materialización en proyectos que conduzcan a expandir las formas en que entendemos nuestro universo y mejoramos nuestro entorno.

Actualmente, en esta revista colaboran compañeros de los posgrados del Instituto de Física (IFUAP), del Centro de Investigación en Dispositivos Semiconductores (CIDS) y de la Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas (FCFM). No obstante, confiamos en una mayor participación de más unidades académicas en un futuro. La invitación para participar en este proyecto está abierta para cualquier universitario que comparta nuestro entusiasmo por transmitir el conocimiento científico a un público amplio y diverso.

Agradecemos de manera muy especial el tiempo y esfuerzo de todos nuestros compañeros que se sumaron para lograr esta nueva edición. Esta es una razón por la que estamos convencidos que el contenido de este ejemplar será de mucho agrado para nuestros lectores.

Finalmente, reiteramos que la participación de toda la comunidad es esencial para la continuidad y éxito de esta iniciativa. ¡Sigamos logrando que *Con-ciencia* sea una revista de todos!

Comité Editorial

Año 2. Núm. 1 – Verano 2018  
Tiraje de 100 ejemplares impresos.

---

# Contenido

---

■ Presentación .....	2
■ <b>La portada:</b> Fractalidad: la morfología de lo amorfo .....	3
José R. Nicolás Carlock	
■	
■ Cristales líquidos .....	13
Aletvia Andrea Cuetlach Martinez	
■ Historia desarrollo y actualidad de las celdas solares .....	17
Esteban Ojeda Durán	
■ <b>Local:</b> Dra. Estela Gómez Barojas .....	22
Leticia Treviño Yarce, Claudia Antonio Hernández, Guillermo Santamaria Juárez	
■ ¿Qué es un semiconductor? .....	28
Dalia Tellez Flores y Ricardo Bolaños Pérez	
■ La aproximación de Hartree-Fock .....	33
Jorge Ríos Ramírez	
■ <b>Actualidad:</b> El grafeno y los materiales bidimensionales .....	38
Juan Hernández Tecorralco	
■ Marcha por la Ciencia .....	44
Diana del Carmen Rojas Ciofalo	
■ <b>Ilustrada:</b> Stephen Hawking .....	47
Alexander Joan Cristo Juárez Domínguez	

---

# Presentación

---

En este tercer número de *Con-Ciencia Estudiantil*, esperamos que gracias al apoyo de todos ustedes, nuestros lectores y colaboradores, así como de la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas (FCFM), del Instituto de Física Ing. Luis Rivera Terrazas (IFUAP) y del Centro de Investigación en Dispositivos Semiconductores (CIDS), existan muchos números más.

El objetivo de *Con-Ciencia Estudiantil* es convertirse en un espacio para la divulgación de la ciencia donde los principales protagonistas sean los estudiantes, tanto de las licenciaturas como de los posgrados del área de ciencias de nuestra universidad. Número a número nos encontraremos con cuatro secciones fijas:

- *Portada*: estará sujeta a concurso para que ustedes compartan con nosotros alguna foto o imagen de algún experimento o resultado que, más allá de su belleza, nos enseñe algo importante e interesante sobre la ciencia. La intención es que además de la gráfica acompañemos nuestra portada con una breve explicación de lo que ésta nos muestra (una o dos páginas).
- *Local*: nos presentará entrevistas a investigadores locales destacados. Aquí trataremos de conocer un poco más sobre su vida, cómo llegaron a una carrera de ciencias, qué hacen actualmente, así como algunos de los consejos que tienen para nosotros los estudiantes.
- *Actualidad*: tendrá tópicos diversos, desde acontecimientos que han marcado el rumbo de la historia de la ciencia, hasta acontecimientos recientes e importantes.
- *Ilustrada*: se encargará de llevar a ustedes fotografías relevantes sobre la historia de la ciencia en general.

Además de las secciones fijas, habrá espacio para múltiples artículos cortos de divulgación elaborados por estudiantes interesados en compartir lo que hacen y lo que les gusta de la ciencia. A partir de ahora estaremos en espera de sus colaboraciones para el siguiente número de nuestra revista. Así también, reservaremos espacios para difundir información sobre congresos, concursos, escuelas y todas las actividades relacionados con la ciencia llevadas a cabo en la universidad.

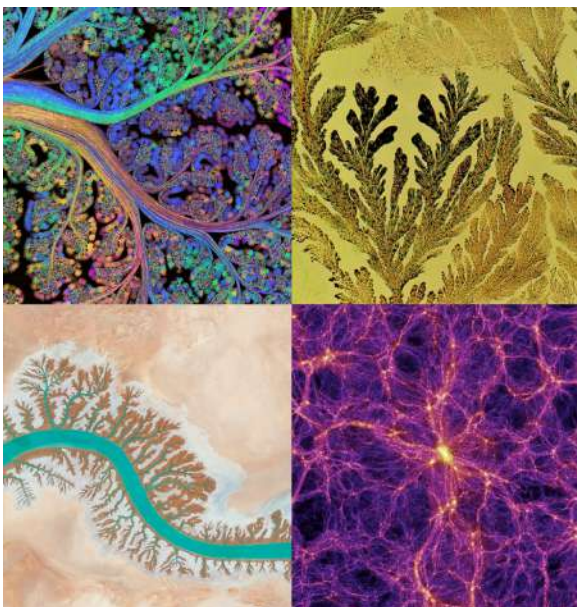
Por último, no nos queda más que agradecer la atención y el tiempo que le dediquen a la lectura de este número. Esperamos que sea de su agrado y que nos escriban a **conciencia.buap@gmail.com** todos sus comentarios, sugerencias y aportaciones.

Comité Editorial

## Fractalidad: la morfología de lo amorfo

*“Gran parte del mundo se caracteriza por ser de alta irregularidad e infinita complejidad. No obstante, en este infinito mar de complejidad se encuentran dos islas de simplicidad: una de simplicidad Euclidiana y otra de una simplicidad relativa, en donde la irregularidad está presente pero es la misma a todas las escalas.”*

*Benoit B. Mandelbrot, El Fractalista*



**Fig. 1.** Arriba-Izquierda: La estructura laminar del cerebelo. Fuente: Greg Dunn ([www.gregdunn.com](http://www.gregdunn.com)). Arriba-Derecha: Células tumorales. Fuente: Margaret Oechsli en “Cancer therapy: an evolved approach” *Nature* 532, 166 (2016). Abajo-Izquierda: Formas dendríticas cerca de la laguna Shadegan en Irán. Fuente: “Overview: A New Perspective” por Benjamin Grant ([www.dailyoverview.com](http://www.dailyoverview.com)). Abajo-Derecha: Estructura a gran escala del universo. Fuente: “The Millenium Simulation Project” (Instituto Max-Planck de Astrofísica).

En su famoso libro *La geometría fractal de la naturaleza*, el matemático Benoit B. Mandelbrot (1924 - 2010) hace una observación simple –

y aparentemente trivial – acerca de las formas que cotidianamente podemos encontrar a nuestro alrededor. Él comenta que “las nubes no son esferas, las montañas no son conos, las líneas costeras no son círculos, la corteza de los árboles no es suave, ni los relámpagos viajan en línea recta” sino que de manera más general, “la naturaleza es tan irregular y fragmentada” que “no solo exhibe un alto grado, sino un nivel totalmente diferente de complejidad” [1]. Ante esta realidad, de la inherente irregularidad de los patrones geométricos observados en diversos sistemas naturales y la clara deficiencia de la geometría suave y continua de Euclides para describirlos, Mandelbrot propone un cambio de enfoque, tanto en la concepción como en las herramientas de estudio de sistemas que exhiben esta nueva complejidad. A esta complejidad Mandelbrot la denomina fractalidad.

Del latín *fractus*, esto es, “fragmentado” o “irregular”, los fractales se encuentran por doquier en la naturaleza; en todas sus escalas espaciales, tanto en sistemas vivos como inertes. Por ejemplo (de portada): a escalas pequeñas, se les ha observado en la forma de las poblaciones de células tumorales; a escalas medianas, se les ha encontrado en la intrincada estructura de nuestro cerebelo o en las formas dendríticas de los ríos;

incluso, se les ha encontrado en la estructura a gran escala de la distribución de galaxias del universo mismo. La diversidad de sistemas en donde es posible encontrarlos son tan vastos que es precisamente esta universalidad lo que ha capturado la imaginación de filósofos y científicos por siglos. En particular, la recurrencia de algunas formas, como las estructuras ramificadas observadas en varios sistemas de transporte – como los sistemas vasculares de animales y plantas, o los sistemas nerviosos – les hace ser catalogados como soluciones óptimas a problemas de adaptación que procesos evolutivos han desarrollado a lo largo de millones de años [2].

*La existencia de estos patrones [fractales] nos reta a estudiar estas formas que Euclides hace a un lado por “carecer de forma”, esto es, a investigar la morfología de lo “amorfo”. – Benoit B. Mandelbrot, La geometría fractal de la naturaleza.*

Aunada a esta universalidad, la principal característica que separa a los fractales del resto de las formas geométricas es una simetría muy peculiar conocida como auto-similaridad o invarianza ante transformaciones de escala. Bajo esta simetría, los fractales naturales se caracterizan por lucir similares o iguales a sí mismos en todas sus escalas posibles de observación, debido a que sus niveles de irregularidad o fragmentación se repiten de forma idéntica a lo largo de toda su estructura. Esto es, cuando se trata de fractales, las partes son iguales al todo y viceversa\*. En particular, esta propiedad de auto-similaridad les concede propiedades extraordinarias que por mucho tiempo hicieron que los primeros matemáticos que comenzaron a estudiarlos y crearlos, los consideraran como seres imperfectos, como patologías o monstruos. Propiedades como áreas finitas contenidas por

perímetros con longitudes divergentes, como sucede en la famosa paradoja de “la longitud de la costa de Inglaterra”, o en fractales artificiales (o matemáticos) como el “copo de nieve” de Koch. O bien, así como fácilmente entendemos que los cambios de escala de un segmento de línea son lineales en su longitud o que los cambios en el área de un círculo son cuadráticos en su radio, los fractales se caracterizan por tener cambios de escala fraccionarios, donde a esta cantidad no-entera se le conoce como dimensión fractal.

Estas características tan particulares, reflejadas tanto en su ubicuidad como en su presentación y soluciones ideales a problemas de optimización, los han hecho muy interesantes y relevantes, no solo desde el punto de vista científico sino también del tecnológico. En años recientes, los avances en poder de cómputo, procesamiento de datos y herramientas de visualización, han permitido que los conceptos y herramientas de la geometría fractal vayan más allá de los sistemas físicos para los cuales fueron creados, a tener un papel importante en la solución de problemas de relevancia global. Hoy en día, basta una rápida búsqueda en línea para encontrar su aplicación en campos tan diversos como medicina, fisiología, neurociencias, telecomunicaciones, finanzas, crecimiento urbano, diseño de redes y muchos más.

A la luz de esto, es claro que los fractales son más que bonitas figuras que aparentemente carecen de utilidad (como muchos en su tiempo lo criticaron\*\*). Su existencia “nos reta a estudiar estas formas que Euclides hace a un lado por carecer de forma, esto es, a investigar la morfología de lo amorfo” [1]. Es en esta búsqueda donde el mismo Mandelbrot nos recuerda que “la geometría fractal no solo es un capítulo más de

las matemáticas, sino uno que [nos] ayuda a ver el mundo [con todos sus problemas y complejidades] de una manera diferente.”

\* En el caso de los fractales naturales (o físicos) esta auto-similaridad es en promedio, es decir, los niveles de irregularidad son estadísticamente semejantes debido a que su inherente aleatoriedad no es exactamente la misma a escalas diferentes. En el caso de los fractales matemáticos (dados por una regla de iteración, como el triángulo de Sierpinski o la curva de Koch), esta aleatoriedad o irregularidad no está presente y por tanto, la auto-similaridad es determinista (exactamente la misma forma a cualquier escala).

\*\* “Por muchos años he escuchado el comentario que los fractales hacen muy bonitas figuras pero son bastante inútiles. Eso me molestaba porque las aplicaciones importantes siempre toman tiempo para ser reveladas. En el caso de los fractales, resultó que no tuvimos que esperar por mucho tiempo.” – Benoit B. Mandelbrot, *A Theory of Roughness*. Entrevista en *The Edge* (2004).

## REFERENCIAS

[1]B. B. Mandelbrot, *The fractal geometry of nature*, 1st ed. New York: VH Freeman, 1983.



Dr. José R. Nicolás Carlock

Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”,  
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

Líneas de investigación: Sistemas Complejos.

E-mail: jnicolas@ifuap.buap.mx

Página web: jrncarlock.wordpress.com

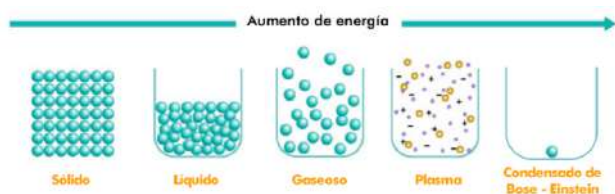
**Egresado del doctorado en ciencias (física).**

[2]A. Bejan and J. P. Zane, *Design in Nature: How the Constructal Law Governs Evolution in Biology, Physics, Technology, and Social Organizations*, 1st ed. Anchor Books, 2012.

## ¿Cómo han cambiado los cristales líquidos tu vida?

Aletvia Andrea Cuetlach Martínez

Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas  
Benemerita Universidad Autónoma de Puebla  
C.U. Avenida San Claudio y 18 Sur,  
Colonia San Manuel, Puebla, Pue. C.P. 72570 México  
al3tv1ia@gmail.com



**Fig. 1.** Cinco estados de agregación de la materia clasificados de menor a mayor energía. Para el condensado de Bose-Einstein se necesita una temperatura muy cercana al cero absoluto ( $-273\text{ }^{\circ}\text{C}$ ).

Seguramente alguna vez has escuchado hablar de cristales líquidos pues estos han cambiado nuestra forma de vivir. Los podemos encontrar en objetos tan cotidianos como calculadoras, celulares, computadoras y en todo artefacto que cuente con displays, también en ventanas, termómetros, maquillaje, tejidos resistentes a fuego e impactos e inclusive en nuestro cuerpo pues las membranas de las células son un tipo de cristal líquido; pero ¿qué son y cómo funcionan?

La mayoría de las personas se quedan con la idea de que los estados de la materia son solo tres: líquido, sólido y gaseoso, pero esto no es del todo correcto (ver **Fig. 1**). En particular, ciertos materiales no muestran una sola transición hacia el líquido, más bien una cascada de transiciones que implican nuevas fases. Las propiedades mecánicas

y de simetría de estas fases son intermedias entre las de un líquido y las de un cristal recibiendo así el nombre de fases mesomórficas o mesofases, mayormente conocidos como cristales líquidos. Para entender el significado de estos nuevos estados de la materia, puede ser útil que recordemos las diferencias entre los cristales y los líquidos.

En los cristales, las moléculas están ubicadas en posiciones bien definidas y preservando esas condiciones por largo tiempo, salvo algunos movimientos sin efectos de traslación, pueden presentar algún tipo de anisotropía, poseen una temperatura definida de punto de fusión que los diferencia de los sólidos amorfos. En un líquido, las partículas que lo componen están completamente desordenadas y no presentan ninguna clase de anisotropía. (Nota: a diferencia de los gases, los líquidos NO están desordenados completamente. Estos presentan correlaciones de corto alcance como lo describe su función radial de distribución. Ver por ejemplo: [1])

Para comprender mejor el concepto de anisotropía:

*“Digamos que un cristal es como la formación de los alumnos de una escuela, donde la distancia*



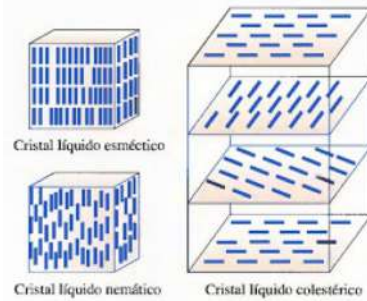


**Fig. 2.** Comportamiento del benzoato de colesterilo.

*entre los alumnos en una fila no es la misma que la distancia entre las filas, de modo que cuando alguien quiere atravesar la formación por en medio, no es lo mismo que lo haga en una dirección o en otra. En un líquido, en cambio, es como si todos los alumnos rompieran filas y estuvieran libres de moverse por todo el patio; entonces, como todos van para todas partes, alguien que quiera atravesar el patio por la mitad no va a ver diferencia entre ir en una u otra dirección”[2].*

La historia de los cristales líquidos comienza en 1888 cuando Friedrich R. Reinitzer nota que el benzoato de colesterilo (**Fig. 2**), una sustancia sólida que aisló a partir de colesterol, tiene dos puntos de fusión. Un año después, el físico alemán Otto Lehmann descubrió que, el benzoato de colesterilo presentaba zonas de estructura molecular cristalina. Fue éste quien los denominó “cristales líquidos”.

Lehmann no fue el único que sintió curiosidad, otros científicos comenzaron la búsqueda de



**Fig. 3.** Orientación de las moléculas según la clasificación de cristales líquidos.

sustancias similares, encontrando varios derivados del colesterol y de tintes. Daniel Vorlander fue el primero en observar que una sustancia poseía más de una fase líquida cristalina e identificó qué tipos de sustancias podían ser cristales líquidos. Georges Friedel describió las diferentes fases del cristal líquido y propuso un esquema de clasificación en (ver **Fig. 3**):

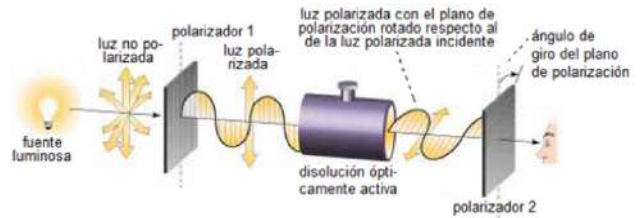
- **Esméticos:** Muestran capas paralelas bien definidas de partículas posicionadas al azar con una orientación fija. Los movimientos posibles en esta forma son la translación dentro de una capa pero no entre capas, y la rotación sobre el eje de orientación.
- **Nemáticos:** La posición de las partículas es desordenada, éstas tienen forma de varilla o hilos y apuntan a una misma dirección. Son libres de moverse en todas las direcciones pero pueden rotar solamente sobre sus ejes de orientación.
- **Colestéricos:** son llamados así debido a que su estructura molecular es similar a la del colesterol. Tiene una organización en capas, sin embargo cada plano tiene una rotación con respecto al siguiente y una orientación distinta. Al pasar de un plano a otro describe una trayectoria en forma de hélice.

En los años 20 el fenómeno ya estaba aceptado en la comunidad científica. Sin embargo, el interés por los cristales líquidos decayó porque no se encontraba aplicación. En los 60 la atracción vuelve a surgir y comienzan a emplearse como indicador de la temperatura, en termografía y medicina, para más tarde utilizarse también en moda y cosmética.

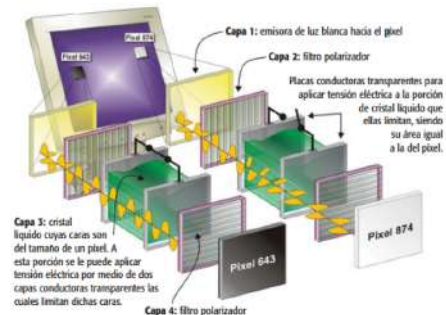
Fue hasta 1970, que se demostró que la corriente eléctrica de baja intensidad cambia la estructura interna de la mesofase, lo que provoca variaciones en sus propiedades ópticas. Estas variaciones fueron aprovechadas, junto con otras propiedades como la polaridad de sus moléculas, en los primeros aparatos de cristal líquido, tales como las calculadoras, que requerían poca energía. En 1976, la compañía Merck comenzó a patentar diferentes mezclas de cristales líquidos, y en 1980 desarrolló el VIP Display, el “panel independiente de visión”, las bases de todas las matrices activas de las pantallas planas LCD.

Los cristales líquidos poseen propiedades físicas y ópticas muy interesantes, lo que les ha dado la relevancia que tienen. Entre las propiedades más importantes tenemos:

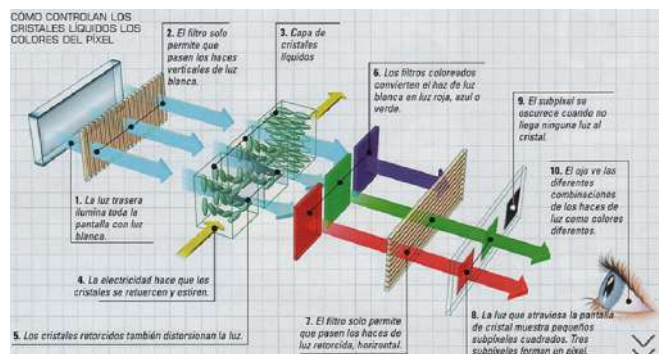
- Actividad Óptica. Propiedad de una sustancia que se caracteriza por rotar el plano de polarización de un haz de luz polarizada que la atraviesa (**Fig. 4**).
- Polaridad. Las moléculas de los cristales líquidos pueden ser polares, es decir que pueden presentar una distribución no uniforme de cargas eléctricas, constituyendo un dipolo, objeto en el que están presentes dos polos eléctricos, el negativo y el positivo.



**Fig. 4.** Esquema de actividad óptica.



**Fig. 5.** Esquema de una pantalla monocromática.



**Fig. 6.** Esquema de cristal líquido con tres filtros para formar un píxel de color.

Conociendo todo esto ya podemos imaginarnos cómo funcionan las pantallas ya sea en blanco y negro (**Fig. 5**) o en color (**Fig. 6**).

Aunque parezca que se lleva mucho tiempo estudiándolos aún falta mucho por comprender de sus propiedades física y química, siendo esto solo una pequeña parte de la historia y de lo que se puede hacer con los cristales líquidos; pues en

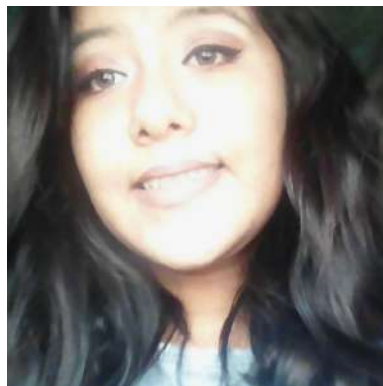
general se pueden encontrar abundantemente en seres vivos, lo que les da un gran impacto en medicina y no solo eso también están presentes en muchos fluidos comunes, como el jabón [3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12].

## REFERENCIAS

- [1]WikiBooks. Molecular simulations.
- [2]C. Velásquez. Cristales ¿líquidos? cienciorama, unam.
- [3]P. J. Collings and M. Hird, *Introduction to liquid crystals Chemistry and Physics*. Philadelphia, USA: Taylor and Francis Ltd, 1997.
- [4]I. C. Khoo, *Liquid crystals: physical properties and nonlinear optical phenomena*. USA: Jhon Wiley and Sons, Inc., 1995.
- [5]A. M. Pérez, “Estudio de los eigenvectores de una lcd-tn para generar modulación de fase,” Licenciatura, FCFM, BUAP, Puebla, Junio 2005.
- [6]E. A. I. Aragon. Cristales líquidos.
- [7]MAVVAND. Cristales líquidos. espacio de la ciencia y la tecnología.
- [8]M. Chemicals. ¿qué son los cristales líquidos?.
- [9]I. C. Khoo, *Liquid crystals*, 2nd ed. USA:

Jhon Wiley and Sons, Inc., 2007.

- [10]S. Francesco, *Nonlinear optical properties of liquid crystals and polymer dispersed liquid crystals*. World Scientific., 2005.
- [11]P. G. Gennes and J. Prost, *The Physics of liquid crystals*. New York, USA: Clarendon Press Oxford, 1993.
- [12]N.A. Capítulo 6: Cristales líquidos.



Aletvia Andrea Cuetlach Martínez

Actualmente realiza sus estudios en la Facultad de Ciencias Físico Matemáticas en la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

## Historia, Desarrollo y Actualidad de las Celdas Solares

Esteban Ojeda Durán

Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores ICUAP  
Benemerita Universidad Autonoma de Puebla  
Av. San Claudio S/N Ciudad Universitaria,  
Puebla, Pue. C.P. 72570 México  
esteban.ojeda@alumno.buap.mx

### RESUMEN

Sabemos que existen diferentes fuentes de energía renovable como son la eólica y la hidráulica, pero recientemente la que ha sobresalido por su proyección de crecimiento en su aprovechamiento es la energía solar. El aprovechamiento de esta energía no sería posible sin un cercano confidente entre el Sol y la energía obtenida, el cual es la celda solar. Este dispositivo tan enigmático, oscuro y tranquilo (que pareciera que no rompe un plato) es un dispositivo de los más desarrollados actualmente, y que al paso de los años se ha ido reinventando conforme han avanzado las exigencias del mundo. En esta breve reseña haremos un viaje a través del nacimiento, generaciones y desarrollo actual de las celdas solares.

### 1 NACIMIENTO DE LA CELDA SOLAR

Era el año de 1839 cuando el científico francés Edmond Becquerel descubrió el efecto fotovoltaico. Dicho efecto convierte la luz en electricidad a través de un medio, en el caso de las celdas solares, es una unión tipo PN. En 1873 el ingeniero eléctrico inglés Willoughby Smith descubrió el efecto de fotoconductividad en el selenio, el cual hace al material más conductivo debido a la absorción de radiación electromagnética. En consecuencia, en 1876

el profesor inglés William Grylls Adams y el profesor Richard Evans Day descubrieron que el selenio produce electricidad cuando es expuesto a la luz. Partiendo de los descubrimientos anteriores, el inventor estadounidense Charles Fritts utilizó selenio recubierto con una delgada capa de oro en 1883 [1].

Las celdas solares resultantes contaban con una eficiencia alrededor del 1% debido a las propiedades del selenio. A pesar de la baja eficiencia, envió uno de sus paneles solares a Werner von Siemens, quien era inventor y fundador de la empresa Siemens AG. Los paneles generaron electricidad cuando se situaron bajo la luz del Sol dejando impresionado a Siemens, y así, presentó el panel de Fritts a la Real Academia de Prusia. Siemens declaró al mundo que los módulos estadounidenses presentaron por primera vez la conversión directa de la energía de la luz solar en energía eléctrica [2].

“En 1887 Heinrich Hertz descubrió el efecto fotoeléctrico al observar que el arco eléctrico que salta entre dos electrodos conectados a alta tensión alcanza distancias mayores cuando se ilumina con luz ultravioleta que cuando se deja en la oscuridad” (ver en Wikipedia el artículo del efecto fotoeléctrico). Este efecto no sería explicado teóricamente hasta 1905 por Albert Einstein, posteriormente, se profundizaría en

la diferencia entre el efecto fotoeléctrico y el efecto fotovoltaico. En 1953 en los laboratorios Bell descubrieron que el silicio podía ser más eficiente que el selenio, y para 1954 los inventores Gerald L. Pearson, Daryl M. Chapin y Calvin S. Fuller inventaron una celda con este material que alcanzaba una eficiencia del 6%.

## 2 ¿CÓMO FUNCIONA UNA CELDA SOLAR?

Todas las celdas solares tienen el mismo propósito: absorber la mayor parte del espectro electromagnético, principalmente en la región del visible. El espectro visible va de los 350 nm a los 750 nm aproximadamente (Fig. 1). Y conforme a la energía irradiada por el Sol, ésta es emitida en su mayoría en el espectro visible (Fig. 2).

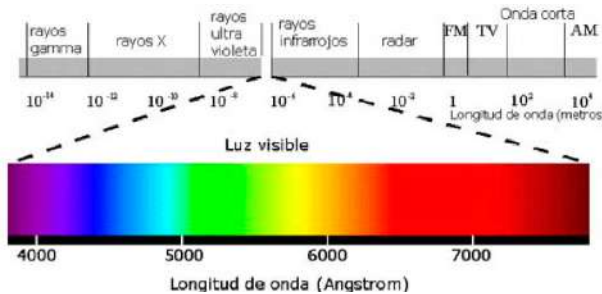


Fig. 1. Espectro electromagnético. Imagen tomada de: <http://reflexionesfotograficas.blogspot.com/2011/01/el-espectro-visible-los-colores.html>

La celda solar está regida por el efecto fotovoltaico, el cual es diferente al efecto fotoeléctrico. Una concepción simplificada de ambos fenómenos es que el efecto fotoeléctrico sucede cuando una excitación electromagnética (luz) con suficiente energía incide en un material y desprende un electrón de dicho material. Mientras que en el efecto fotovoltaico la luz incidente impacta en un portador de carga de un material (como un electrón), y tiene energía suficiente para promoverlo a estados de mayor energía pero sin desprenderlo del mismo.

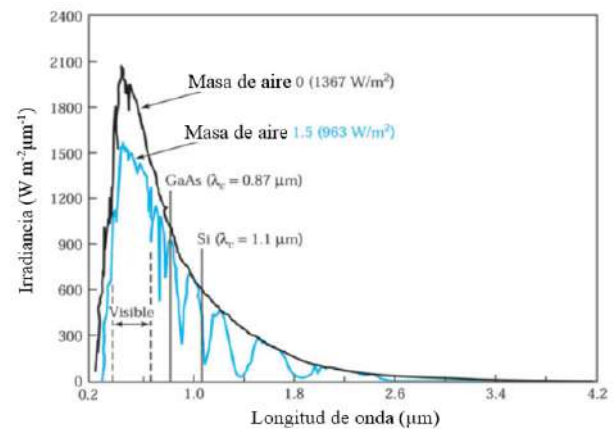


Fig. 2. Irradiancia del Sol sobre el planeta [3].

Para describir cómo ocurre el efecto fotovoltaico en una celda solar, es preciso describir primero los materiales con los que está constituida dicha celda. Las celdas solares son generalmente construidas con materiales semiconductores, estos materiales se comportan como un aislante o un conductor en función de múltiples factores como la temperatura, la pureza del material, entre otros. En los semiconductores los portadores de carga pueden ser electrones o ausencia de ellos (huecos); los semiconductores son tipo *n* si el portador de carga es electrón o tipo *p* si el portador de carga dominante es el hueco. Se necesita de la unión de ambos materiales para construir una celda solar, a la unión de un material tipo *p* y un material tipo *n* es conocida como unión tipo *PN*.

El efecto fotovoltaico en un material semiconductor se produce como sigue: la unión tipo *PN* absorbe los fotones de la luz, los cuales tienen cierta energía, posteriormente crea pares electrón-hueco y los transporta a los electrodos. Estos electrones se desplazan dentro de la unión tipo *PN* produciendo una corriente eléctrica. A mayor cantidad de fotones absorbidos, se creará una mayor cantidad de pares electrón-hueco; he aquí el por qué se necesita que la celda solar absorba en el espectro visible. La celda solar inventada en los laboratorios Bell opera bajo el mismo principio

del transistor: una unión tipo *PN*. Este tipo de celda solar es la que actualmente se conoce a nivel mundial y se ha tratado de mejorar realizándole ciertas modificaciones.

### 3 GENERACIONES Y EFICIENCIAS DE CELDAS SOLARES REPORTADAS EN LA ACTUALIDAD

Las celdas solares se dividen en tres generaciones, estas generaciones son dependiendo del avance en el estudio y modificaciones o descubrimientos que se han realizado, pero todas con la misma base: producir energía a partir de la energía del Sol.

La *primera generación* es la perteneciente a las celdas solares monocristalinas de silicio, las cuales son las celdas que tienen mayor tiempo pues han venido desarrollándose desde la invención de las celdas solares. A partir de estas celdas se buscaron variaciones, como son las celdas policristalinas de silicio y las celdas de silicio amorfo, que hasta el año actual (2018) han alcanzado la eficiencia de 26.3% por parte de los laboratorios Kaneka de Japón.

La *segunda generación* también es conocida como celdas solares de película delgada, las cuales comparadas con las de la primera generación, que tenían un espesor de 300 a 500  $\mu\text{m}$ , ahora tienen un espesor de sólo unos cuantos micrómetros (entre 1  $\mu\text{m}$  y 4  $\mu\text{m}$ ). Las celdas solares de esta generación se hicieron de diferentes materiales siguiendo inicialmente con la rama de silicio, pero siendo las de silicio amorfo hidrogenado (*Si:H*) las iniciales de dicha segunda generación. Posteriormente fueron desarrolladas las celdas con telurio de cadmio (*CdTe*), cobre, indio y selenio (*CIS*) y cobre, indio, galio y selenio (*CIGS*) de las más reconocidas. Hasta ahora el récord de dichas celdas solares la obtuvo la celda solar de *CIGS* elaborada por el laboratorio ZSW, la cual obtuvo una eficiencia de 22.6%.

La *tercera generación* se desarrolló debido a los altos costos de fabricación de celdas solares de primera generación y a la alta toxicidad y disponibilidad de los elementos químicos de la segunda generación. Los tipos de celda solar más sobresalientes de esta generación han sido las sensibilizadas con tinta, celdas solares con puntos cuánticos, celdas solares orgánicas y de perovskita, siendo éstas últimas las de mayor popularidad en años recientes. Hablando de éstas, las celdas solares de perovskita han tenido un enorme auge ya que se han alcanzado eficiencias muy altas en pocos años de estudio (2013 a la fecha), de las cuales la primera celda solar alcanzó un 13% y actualmente se han reportado eficiencias de 22.7%, obtenidas por el Instituto de Investigación de Tecnología Química de Corea (KRICT, por sus siglas en inglés). Desafortunadamente dichas celdas solares no se han podido comercializar ya que no se ha logrado estabilizar el funcionamiento de éstas (su eficiencia baja con el paso del tiempo debido a diversos factores, siendo la humedad uno de los principales problemas).

Por parte de las celdas solares orgánicas, se han alcanzado eficiencias del 11.5%, obtenida por la Universidad de Ciencia y Tecnología de Hong Kong. En esta celda utilizaron diferentes polímeros como lo son: el polímero de banda prohibida o bandgap pequeño (LBG, por sus siglas en inglés), el poli(3,4-etilendioxitiofeno)-poli(estireno sulfonato) (PEDOT:PSS), [6,6]-fenil  $C_{71}$  éster metílico de ácido butírico (*PC<sub>71</sub>BM*) y el poli(3-hexiltiofeno-2,5-diil) (P3HT).

En las celdas solares de puntos cuánticos se utilizó triyoduro de plomo cesio (*CsPbI<sub>3</sub>*); esta celda alcanzó una eficiencia de 13.4%, la cual fue fabricada por el Laboratorio Nacional de Energía Renovable (NREL, por sus siglas en inglés). Y finalmente la celda solar sensibilizada por tinta consiste en una matriz de óxido de titanio (*TiO<sub>2</sub>*) y se le aplica una tinta de rutenio; esta celda

fue hecha por Sharp y alcanzó una eficiencia de 11.9%. En la Fig. 3 se muestran las eficiencias reportadas de celdas solares a través de los años, así como su desarrollo y aumento de eficiencias. Todos estos datos son recolectados por el NREL [4, 5].

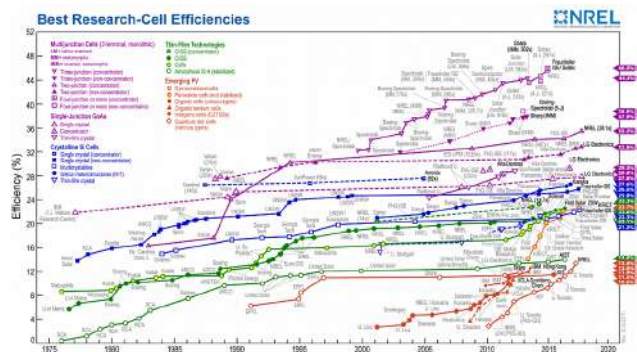


Fig. 3. Las mejores eficiencias reportadas mundialmente, compiladas por el NREL.

#### 4 CELDAS EN DESARROLLO

Algunas de las celdas solares de las que se han reportado un avance son por ejemplo: las de perovskitas, de kesteritas y celdas solares que utilizan el efecto down-conversion, el cual consiste en convertir un fotón del alta energía en varios fotones de baja energía aprovechando así un mayor rango del espectro de energía suministrado por el Sol que hasta ahora era desaprovechado por otras celdas.

Las celdas solares con perovskitas son actualmente una gran rama de estudio, éstas pueden ser obtenidas con diferentes materiales, ya sea que incluyan estaño o plomo; siendo las de plomo las que reportan mejores eficiencias. Desafortunadamente su toxicidad y su inestabilidad son lo que aún no han podido darle un impulso mayor para su posible producción. En la Fig. 4 se muestra una imagen transversal de una celda solar de perovskita.

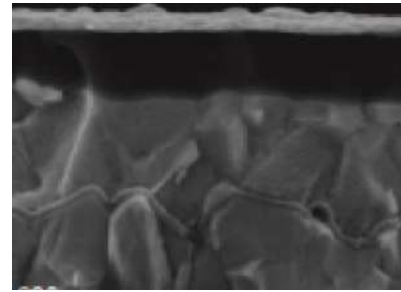


Fig. 4. Imagen transversal de una celda solar de perovskita [6].

Por otra parte, las celdas solares de kesteritas también han sido estudiadas en la literatura. Estas celdas comprenden un material cuaternario el cual contiene cobre, zinc, estaño y azufre (*CZTS*). Este material fue buscado tratando de suplir al *CIGS* ya que la toxicidad del selenio es alta, además en el planeta hay poca abundancia de indio (0.3 ppm) y de galio (10 ppm), comparado con la abundancia del cobre (60 ppm) y el zinc (300). Al cuaternario *CZTS* (ver Fig. 5) también se le puede agregar selenio obteniendo así  $Cu_2ZnSn(S,Se)_4$  lo cual realizaron en los laboratorios de IBM consiguiendo eficiencias de 11.1% [7].

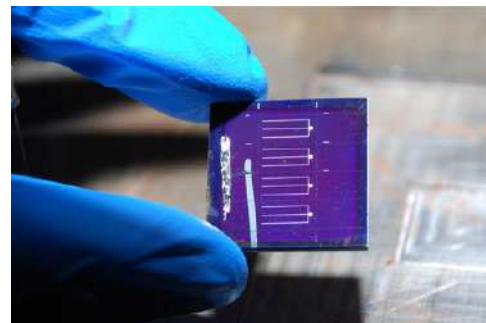
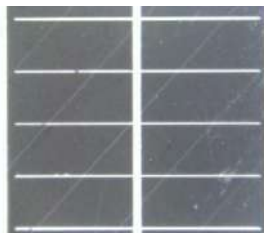


Fig. 5. Celda solar de  $CZT(S,Se)$  creada por IBM con eficiencia de 11.1%.

Otro tipo de celdas solares que se está desarrollando son las que contengan un material que pueda realizar un efecto down-conversion, es decir que absorba fotones en altas energías (en el

rango del UV) y emitan los fotones en el infrarrojo del espectro electromagnético. Esta aplicación puede ayudar directamente a las celdas solares de silicio pues éstas pueden absorber energía en el infrarrojo. Uno de estos materiales es el óxido de silicio fuera de estequiometría ( $SiO_x$ ), el cual absorbe la radiación en energías del UV y re-emite en el infrarrojo. Estas celdas solares han alcanzado eficiencias del 6%. En la Fig. 6 se muestra una celda solar de silicio con una capa de  $SiO_x$  en su superficie.



**Fig. 6.** Celda solar de silicio con una capa de  $SiO_x$  en su superficie.

## 5 CONCLUSIONES

Las celdas solares actualmente son una tecnología de poco uso dentro de las energías renovables, éstas representan menos del 5% del total respecto a otro tipo de fuentes de energía renovable. En Norteamérica se tiene previsto un incremento en la cuota de generación, se planea que se incrementará al 35% aproximadamente. Para completar esta meta y tener un menor impacto ecológico debemos investigar nuevos materiales y procesos de producción. Los materiales deben ser reutilizables, permitir construir celdas solares más eficientes y los procesos de fabricación generar subproductos menos tóxicos.

## REFERENCIAS

[1](2018, Abril). [Online]. Available: <https://www.solarpowerauthority.com/a-history-of-solar-cells/>

[2]internet. (2018, Mayo) Solar cell. [Online]. Available: [solarcellcentral.com](http://solarcellcentral.com)

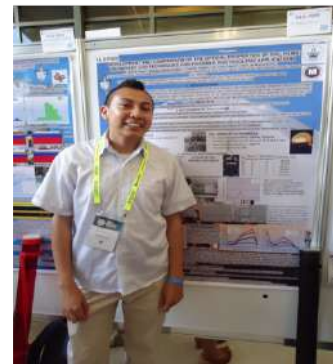
[3]S. Sze and M. Lee, *Semiconductor Devices. Physics and Technology*, 3rd ed. Jhon Wiley and Sons, 2012.

[4](2018, Mayo). [Online]. Available: <http://www.solar-facts-and-advice.com/solar-cells.html>

[5](2018, Mayo). [Online]. Available: <https://www.nrel.gov/pv/>

[6]S. H. Turren-Cruz and et al., “Enhanced charge carrier mobility and lifetime suppress hysteresis and improve efficiency in planar perovskite solar cells,” *Energy Environ. Sci*, vol. 11, pp. 78 – 86, 2018.

[7](2018, Mayo). [Online]. Available: <http://www.kurzweilai.net/ibm-sets-world-record-pv-solar-cell-power-conversion-efficiency>



M. en C. Esteban Ojeda Durán

Ingeniería Mecatrónica en la Universidad Politécnica de Tlaxcala. Maestría en CIDS-ICUAP. Actualmente está estudiando el doctorado en el CIDS-ICUAP. Cuenta con experiencia laboral en la industria automotriz y textil. Ha tenido participación en congresos nacionales e internacionales, como ponente y como staff. Su interés principal son el estudio y desarrollo de las celdas solares de segunda y tercera generación.



## Dra. Estela Gómez Barojas

La Dra. Estela Gómez Barojas estudió la Licenciatura en la Facultad de Físico-Matemáticas y la Maestría en Física del Estado Sólido en el Instituto de Física de la Universidad Autónoma de Puebla. También hizo un Doctorado en Ciencias Naturales (Física) en la Universidad Ludwig-Maximilians en Múnich, Alemania, y una estancia Posdoctoral en el Instituto de Física de la Universidad Autónoma de Puebla.



Fig. 1. Dra. Estela Gómez Barojas.

### ¿Cuál es su área de investigación y en qué consiste?

Las primeras investigaciones que desarrollé fueron, un estudio experimental de capacitores Metal Óxido anódico Semiconductor (MOS) y la caracterización por Espectroscopía Raman de cristales orto-rómbico y triclinico. Posteriormente, la caracterización de diferentes materiales semiconductores en forma de película y/o multi-películas por técnicas en las que la fuente de excitación fueron un haz de electrones como son: Microscopía

Electrónica de Barrido, Espectroscopía de rayos-X por dispersión en energía, Espectroscopía de electrones Auger y Espectroscopía Fotoelectrónica de rayos-X cuya fuente de excitación de esta última técnica son rayos X. Actualmente, conjuntamente con los miembros del Cuerpo Académico al que pertenezco, “Estructuras de baja dimensionalidad”, estamos trabajando, entre otros temas de investigación, la porosificación de silicio tipo-p y tipo-n por procesos: electroquímico, electroless y químico. Adicionalmente, estamos dirigiendo investigaciones relacionadas con la síntesis de óxido de grafeno y su caracterización.

### ¿Qué la motivó a hacer una carrera científica?

El motivo para seguir una carrera científica fue la guía familiar que tuve desde mi niñez, mi padre fue maestro de primaria y siempre impulsó, no solamente a sus hijos sino también a la niñez de los pueblos y ciudades en donde ejerció su profesión, a que continuaran estudiando programas subsecuentes como secundaria y carreras profesionales. Otra situación que en cierta forma nos “motivó” a algunos compañeros de mi generación estudiantil y a mí a continuar con un posgrado fue el hecho de que en ese entonces no existían fuentes de trabajo, cuando nos presentábamos en grupo a solicitar trabajo se nos decía que “teníamos estudios profesionales altos” o que “el puesto que ofertaban no era para físicos”. En ese entonces se

empezaba a escuchar que el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología (CONACyT) ofrecía becas a estudiantes de posgrado. Cabe mencionar que prácticamente toda mi generación concluyó un programa de doctorado. Mi generación la integramos 7 compañeros y mi persona.

**¿Cuáles son las posibles aplicaciones de su línea de investigación?**

Son varias las aplicaciones que tienen los materiales que sintetizamos y que caracterizamos, por ejemplo, el silicio poroso tiene aplicaciones en el área de Medicina, Física, Dispositivos Ópticos y Optoelectrónicos, etc. En particular, en el caso del grafeno y óxido de grafeno que estamos sintetizando, las aplicaciones están orientadas al área de Fotocatálisis y en la fabricación de baterías de Si con ánodo ion de litio.

**¿Cuáles son sus proyectos actuales?**

Como mencioné anteriormente, los trabajos de investigación que estamos desarrollando en este momento incluyen silicio poroso y óxido de grafeno, en particular el proyecto grupal VIEP está relacionado con la obtención de silicio macroporoso por proceso electroquímico, decorarlo con dióxido de titanio y estudiar sus propiedades fotocatalíticas. La incorporación de dióxido de titanio en el silicio poroso se realizará por el método de inmersión, esto es, en una solución fuente de iones de titanio y oxígeno se sumerge una muestra de silicio poroso.

**¿Recuerda a algún profesor o alguna anécdota que le haya motivado para elegir ser investigadora?**

En general, creo que tuve profesores muy buenos en la licenciatura, todos enfocados a dar una buena clase; como estudiante uno los sigue y estudia los temas de clase para poder

aprobar las materias. En particular, recuerdo con gratitud al maestro Agustín Valerdi López. Por otro lado, en 1978, como estudiante independiente en la Universidad de Arizona en Tucson, EUA, tuve la oportunidad de tomar un curso teórico-experimental de Circuitos Integrados, éste fue bastante completo y creo fue el curso que más me motivó a continuar con el área de investigación en materiales semiconductores.

**¿Cuáles son las cualidades más importantes, desde su punto de vista, que debe tener un(a) excelente investigador(a)?**

Un excelente investigador tiene que ser muy trabajador, cumplir con los proyectos que propone desarrollar; además debe incluir enseñar y guiar a estudiantes en sus investigaciones.

**¿Qué aspectos de su trabajo son los que más le agradan?**

Convivir con los estudiantes en el salón de clase, durante la realización de tesis y discutir los resultados que se van obteniendo.

**¿Cuál es su mayor satisfacción a nivel profesional?**

Mi mayor satisfacción es saber que mis estudiantes, la BUAP y el Sistema Nacional de Investigadores (SNI) me han evaluado positivamente. Esto me indica que desempeño bien mi papel como docente y como investigador.

**¿Cuáles son sus proyectos a futuro?**

Continuar con las tareas que actualmente realizo de investigación, dirección de tesis y docencia.

**¿Usted se encuentra actualmente en el padrón de investigadores (SNI) ¿En cuál periodo?**

Sí, soy Nivel I por el periodo 2015 - 2029. La razón del periodo de esta distinción es que de acuerdo al reglamento del SNI, cuando una persona tiene 65 años o más edad y al menos 15 años de permanencia en el SNI, entonces se otorga la distinción por una sola vez hasta por 15 años.

### **¿Cuál es su opinión con respecto al día internacional de la mujer?**

A manera de respuesta, presento la traducción al español de un texto acerca del “Día Internacional de las Mujeres” que aparece en una página electrónica [1]:

“El día internacional de las mujeres” emergió de los movimientos activistas de las trabajadoras en los inicios del siglo XX en Norte América y en Europa. Desde esos primeros años, el día internacional de las mujeres ha asumido una nueva dimensión global para las mujeres de países desarrollados y en desarrollo. El creciente movimiento internacional de las mujeres ha sido intensificado por cuatro conferencias de las mujeres de Naciones Unidas, ha ayudado a hacer de la conmemoración un punto confiable para construir un soporte para los derechos de las mujeres y su participación en las plataformas políticas y económicas. El día internacional de las mujeres es un tiempo para reflexionar sobre el progreso hecho, demandar un cambio y celebrar actos de coraje y determinación de mujeres ordinarias que han jugado un papel extraordinario en sus países y comunidades. Lo siguiente es una breve historia de cómo ha evolucionado el día internacional de las mujeres. El 28 de febrero de 1909 se observó el primer día internacional de la mujer en Estados Unidos. El Partido Socialista de América designó este día para honrar la Primera Huelga de las trabajadoras de confección de ropa en Nueva York en 1908, en la que las mujeres protestaron en contra de las condiciones laborales. En 1910, la Asamblea Internacional Socialista en Copenhague estableció el día internacional de las mujeres con carácter de internacional para honrar los derechos de las mujeres y brindar soporte o apoyo para lograr el sufragio universal para las mujeres. La propuesta se tomó con aprobación unánime de la conferencia de alrededor de 100 mujeres de 17 países, la cual incluyó a las 3 mujeres electas para el Parlamento de Finlandia.

No se fijó fecha para la observancia. Como un resultado de la iniciativa en Copenhague, el día internacional de las mujeres fue conmemorado por primera vez el 19 de Marzo de 1911 en Austria, Dinamarca, Alemania y Suiza, donde más de 1 millón de mujeres y hombres asistieron a la asamblea. Además del derecho a votar, a formar oficinas públicas, demandaron los derechos de mujeres para trabajar, para recibir entrenamiento vocacional y terminar con la discriminación en el trabajo. El día internacional de las mujeres también se convirtió en un mecanismo para protestar en contra de la Primera Guerra Mundial (1914 - 1918). Como parte de los movimientos de paz, las mujeres rusas celebraron su primer día internacional de las mujeres el último domingo de febrero de 1913, en otros lugares de Europa se celebró un día cercano al 8 de marzo del siguiente año, las mujeres realizaron asambleas para protestar contra la guerra o para expresar su solidaridad a otras activistas. Como reacción ante los cuantiosos decesos de soldados de la guerra, las mujeres rusas nuevamente escogieron el último domingo de febrero para declararse en huelga en demanda de “Pan y Paz”. Cuatro días después el zar se vio obligado a abdicar y el Gobierno Provisional otorgó a las mujeres el derecho al voto. El histórico domingo fue el 23 de febrero de 1917, según el calendario juliano utilizado entonces en Rusia y que correspondió al 8 de marzo del calendario gregoriano utilizado en otros países. La Organización de Naciones Unidas (ONU) empezó a celebrar el día internacional de las mujeres el 8 de marzo de 1975. En diciembre de 1977, la Asamblea General de la ONU adoptó una resolución proclamando un ‘día de los derechos de las mujeres y paz internacional’ para ser observada en cualquier día del año por estados miembros de la ONU de acuerdo con sus tradiciones históricas y nacionales. (Traducción de la entrevistada.)

Cabe mencionar que hoy en día se siguen realizando reuniones internacionales de mujeres como son: (1) International Conference of Women in Physics y (2) Reunión Ibero-Americana de Ciencia, Tecnología y Género. Estas reuniones se llevan a cabo cada 3 años en alguno de los países participantes. En estas Conferencias se tratan temas tales como: “ambiente de trabajo” o “cómo lograr puestos de liderazgo”, y se reportan estadísticas respecto a la situación de cada país. En estas Conferencias la Dra. Lilia Meza Montes del IFUAP-BUAP participa activamente.

**¿Cuál es su perspectiva de la mujer en la ciencia?**

La participación e involucramiento de estudiantes mujeres en áreas científicas son crecientes. Las estudiantes universitarias deben darse cuenta de que hoy en día gozan del derecho a la formación profesional, que además en nuestro país la educación es laica y gratuita, características que debemos cuidar y defender. Desde hace algunos años es posible estudiar una licenciatura y un posgrado. Aprovecho la oportunidad para recomendar a las estudiantes que sean responsables, que hagan tareas, que lean fuentes confiables de información para estar actualizadas, que no solo terminen una licenciatura sino que continúen con un programa de posgrado para que el número de investigadoras aumente y sea mayor la participación de las mujeres en Ciencias Exactas, en Ciencias Naturales y en Humanidades, es decir, en todas las áreas del conocimiento.

**¿Qué tan fácil ha sido desarrollarse por su género?**

Todas las instituciones están dominadas por personas de sexo masculino, en mi caso me ha costado abrir puertas, sin embargo, en mi trayectoria como estudiante y profesionista también he encontrado el apoyo de colegas varones y también el apoyo femenino; además de que mis compañeros de camino han sido la necesidad y el tesón para lograr lo que me he propuesto.

**¿Cuál es su experiencia entre la maternidad y su profesión?**

Les puedo decir que para una mujer el ser madre, ser profesionista y también ser hija es difícil, una tiene que dividir su tiempo. Se tiene

que cumplir con las obligaciones de ser madre, por ejemplo, educar al/los hijos, alimentarlos, llevarlos al médico, guiarlos en su educación. Como profesionista una tiene que cumplir con preparar e impartir clases, dirigir tesis, hacer investigación y publicar artículos, y como hija se tiene que cuidar a los padres, que normalmente son personas de la tercera edad, y que de alguna manera una tiene el compromiso moral de atenderlos. A cambio, el deber cumplido da una gran tranquilidad. Recomiendo a estudiantes de ambos sexos atender a sus familiares adultos mayores con respeto, tolerancia y afecto.

**¿Por qué es importante hacer ciencia en México?**

Porque de alguna forma, México es un país principalmente dependiente de Estados Unidos. Si observamos nuestro alrededor, nos daremos cuenta de que existen muy pocos productos hechos en México o con tecnología mexicana y creo firmemente que los programas de profesionalización en licenciatura y posgrado así como el desarrollo de proyectos teóricos y experimentales nos harán más competitivos en el desarrollo científico y tecnológico internacional.

**¿Es verdad que el estudio de la ciencia está destinado a unos pocos?**

Creo más bien que en el estudio de las diferentes áreas del conocimiento, entre ellas ciencias, entra el factor habilidad, es decir, cada niño o niña nace con ciertas habilidades, sólo hay que observar y detectar esas habilidades y cultivarlas.

**¿Qué opina cuando alguien dice: “Sólo la ciencia que se aplica sirve”?**

Creo que las áreas teóricas y experimentales son importantes, complementarias y necesarias para desarrollar posibles aplicaciones tecnológicas.

**¿Cuál es su perspectiva del desarrollo científico en la BUAP?**

El desarrollo científico en la Universidad Autónoma de Puebla es evidente. Tomando como referencia los años finales de la década de los 1960s e iniciales de la década de los 1970s en los que realicé mi licenciatura, el desarrollo de la BUAP ha sido bastante considerable. Hoy en día existen Facultades en diferentes áreas del conocimiento así como también Institutos cuya función primordial de estos últimos es la investigación y la formación de profesionistas a nivel posgrado; la calidad y eficiencia de estos posgrados son evaluadas periódicamente por CONACyT y la producción científica de los investigadores es evaluada por el SNI. Bajo estos esquemas normativos y con recursos suficientes, el desarrollo científico en la BUAP será creciente.

**¿Cuáles cree usted que sean los principales desafíos que enfrentan las universidades para hacer ciencia?**

Uno es la formación de sus propios cuadros académicos y de investigación, y el segundo está relacionado con los presupuestos federal y estatal que se les otorgan.

**¿Cuál considera que es el futuro de la ciencia en nuestro país?**

Si los esquemas normativos que ya mencioné se siguen llevando a cabo en todas las universidades del país, el futuro de la ciencia en nuestro país debe ser positivo.

**¿Qué consejo le daría a los estudiantes universitarios que están planteando entrar en el área de la investigación?**

Que se acerquen, en el transcurso de su licenciatura, a los profesores que están desarrollando proyectos de investigación con el objetivo de irse familiarizando con el área de investigación.

**Para concluir, ¿podría recomendarnos un par de libros que le hayan gustado?**

Un libro que les podría recomendar es el de “El perfume” por Patrick Suskind [2], un libro que describe que “...los olores invocan la invisibilidad y antes del tacto existe el olor?”, no les recomiendo más libros porque mis tareas actuales no me permiten tener tiempo libre para leer un libro completo, mi trabajo requiere leer más artículos científicos o textos cortos. Por ejemplo, estoy suscrita a la American Physical Society y por lo tanto, cada mes recibo la revista Physics Today que publica the American Institute of Physics. Me he enfocado a leer más esta revista y me gusta mucho, porque aparte de contener textos de ciencias trae monografías de algunos científicos, y algunos otros temas. A propósito, en el Physics Today de enero 2018, viene un artículo titulado: Mary Somerville’s vision of Science [3]. Somerville (1780 -1872) nació en Escocia con una habilidad extraordinaria para entender y desarrollar Matemáticas, ella fue prácticamente autodidacta. Ella publicó “On the Connexion of the Physical Science”. Algunos de sus contemporáneos calificaron este trabajo como instrumental para hacer la física moderna una disciplina pero otros contemporáneos formularon preguntas tales como: ¿pueden ser las mujeres excelentes en ciencias? ¿Son los escritos científicos de una mujer inherentemente diferentes a los de un hombre? Somerville constantemente usaba su celebridad como una forma para apoyar las causas que le preocupaban, por ejemplo, ella firmó una de las primeras peticiones del sufragio femenino en 1868. La revista mensual Physics Today se puede consultar en la Biblioteca del Instituto de Física “Ing. Luis Rivera Terrazas”, BUAP.

## REFERENCIAS

[1]W. (2018, Marzo) Día internacional de la mujer. [Online]. Available: <https://womenwatch.unwomen.org/international-womens-day-history>

El comité editorial agradece a la Dra. Estela Gómez Barojas la amabilidad que ha tenido al dedicar parte de su valioso tiempo a esta entrevista y a los Maestros en Ciencias Leticia Treviño Yarce, Claudia Antonio Hernandez y Guillermo Santamaria Juárez (Estudiantes de doctorado CIDS) quienes realizaron esta entrevista.

[2]P. Suskind, *El Perfume*, 1st ed. Barcelona: Seix Barral, 1988.

[3]J. Secord, “Mary somerville’s vision of science,” *J. Physics Today*, vol. 71, no. 1, p. 47, 2018.



## BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

### **Instituto de Física** “Ing. Luis Rivera Terrazas”

Ofrece Maestrías y Doctorados en:

**Física**

**Ciencia de Materiales**

Áreas de Investigación:

Física Teórica  
Física Computacional  
Física de Materia Condensada  
Materiales Avanzados  
Propiedades de Materiales


Programas de posgrado incorporados al Padrón Nacional de Posgrados de Calidad (PNPC) y se cuenta con becas SEP-CONACyT.

El ingreso es anual, en el mes de agosto.

Mayor información en:  
[www.ifuap.buap.mx](http://www.ifuap.buap.mx)



La Sociedad Mexicana de Física convoca al



**LXI Congreso Nacional de Física**

del 7 al 12 de octubre de 2018 en el **Complejo Cultural Universitario Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla, Pue.**

**Temática:**

- Investigación en física básica y aplicada • Instrumentación
- Historia y filosofía de la física • Enseñanza, política científica y temas directamente relacionados con el desarrollo de la física

**Comité organizador**

SOCIEDAD MEXICANA DE FÍSICA  
Apartado Postal 70-348, Coyoacán, 04511, México, D.F.  
Teléfonos/fax: 5622-4848 - 5622-4840 y 5622-4946  
• [smf@ciencias.unam.mx](mailto:smf@ciencias.unam.mx) • [cnf@ciencias.unam.mx](mailto:cnf@ciencias.unam.mx)

Fecha límite para la recepción de resúmenes: viernes 1 de junio de 2018  
Información y registro, <http://www.smf.mx/cnf>

## ¿Qué es un material semiconductor?

Dalia Téllez Flores<sup>1</sup>, Ricardo Bolaños Pérez<sup>2</sup>

Centro de Investigaciones en Dispositivos Semiconductores ICUAP (CIDS-ICUAP)  
Benemerita Universidad Autónoma de Puebla  
C.U. Avenida San Claudio y 14 Sur,  
Colonia San Manuel, Puebla, Pue. C.P. 72570 México  
imat.tellez@gmail.com<sup>1</sup>, ricardobperez@gmail.com<sup>2</sup>

### RESUMEN

En este trabajo se plantea el concepto de material semiconductor, del mismo modo se hacen las interrogantes ¿cuál es su importancia en el mundo de los materiales y qué impacto ha tenido en el desarrollo de la ciencia y la tecnología? Lo que conlleva a introducirnos a la gran gama de aplicaciones de estos materiales y el alcance que se espera tengan en un futuro.

### 1 INTRODUCCIÓN

En general los materiales pueden clasificarse de distintas maneras según las características que estos presenten. Una forma de catalogarlos es tomando como punto de referencia la conductividad eléctrica, esto es, con qué facilidad puede transportarse corriente eléctrica a través de dicho material. Se pueden catalogar también respecto a su resistividad, esto es, la capacidad del material para oponerse al paso de corriente. Debido al comportamiento eléctrico particular de los materiales semiconductores, como se verá más adelante, es posible su aplicación en sistemas fotónicos, electrónicos y de telecomunicaciones tales como transistores, chips, láser, diodos, celdas solares, etcétera.

### 2 BREVE RESEÑA HISTÓRICA DE LOS SEMICONDUCTORES

La era de los semiconductores comenzó aparentemente en 1870 cuando se descubrió que el selenio poseía propiedades foto-luminiscentes; es decir, existe una interacción entre la materia y la luz. Aunque 37 años antes Michael Faraday había reportado que el sulfuro de plata ( $Ag_2S$ ) presentaba una disminución de su resistividad cuando se elevaba la temperatura del mismo, el cual es un fenómeno similar.

Por otra parte, hacia 1873, W. Smith observó que los resistores de selenio exhibían una disminución en su resistencia cuando se les hacía incidir luz. Años después, E. H. Hall demostró, en 1878, que un flujo de portadores de carga se desvía cuando se aplica un campo magnético (efecto Hall) [1]. Esta colección de descubrimientos y experimentos hicieron concluir que la materia y la luz interactúan, esto era una idea revolucionaria para la época ya que aún no se entendía que la luz exhibe un comportamiento de onda y partícula al mismo tiempo.

Alrededor de 1914, J. Koenigsberger clasificó los materiales sólidos en metales, aislantes y conductores variables, pero aun resultaba necesaria una explicación para el cambio de las propiedades de los materiales en presencia de

perturbaciones electromagnéticas; lo cual se logró finalmente entre los años 1931 y 1932, cuando A. H. Wilson desarrolló la teoría de bandas de energía [2].

En cuanto al desarrollo en dispositivos electrónicos, en 1905 J. Ambrose Flemming inventó el primer diodo basado en observaciones hechas en los laboratorios de Edison Electric. Y, al año siguiente, L. DeForest creó el triodo en un tubo de vacío. En 1948, el transistor de unión bipolar, que se desarrolló en los laboratorios Bell por John Bardeen, Walter H. Brattain y William Shockley; fue trascendental para dar paso a una revolución tecnológica [3].

La miniaturización de los circuitos electrónicos fue otro de los grandes pasos en microelectrónica. Este hecho se debe a la invención de J. Kilby: los circuitos integrados en 1958 por Texas Instruments y también gracias a la contribución de Robert Noyce y Gordon Moore. Después desarrollaron métodos para producir e interconectar todos los elementos básicos de un circuito de una pieza de silicio [4].

### 3 TEORÍA DE BANDAS EN SÓLIDOS

La mayoría de materiales semiconductores utilizados en el área de microelectrónica son cristalinos, es decir, presentan un arreglo estructural ordenado de átomos de acuerdo con un patrón geométrico. Hay que recordar que un sólido cristalino está formado por un conjunto de átomos muy próximos entre sí, este hecho hace que los electrones de su última capa sufran la interacción de átomos vecinos, lo que ocasiona que los niveles de energía de cada átomo se vean afectados, resultando en un traslape de orbitales en forma de bandas de energía. Esta se conoce como la teoría de bandas y constituye una explicación alternativa del comportamiento de los materiales semiconductores.

Una forma fácil de visualizar las bandas

de energía para diferenciar a los conductores, aislantes y semiconductores, es dibujar las energías disponibles de los electrones en el material. En los aislantes, los electrones de la banda de valencia están separados de la banda de conducción por una banda prohibida, ésta posee valores de energía mayores a 4 eV (Figura 1). En los conductores la banda de valencia se sobrepone con la banda de conducción, en consecuencia, estos materiales no presentan una banda prohibida. En los semiconductores la banda de conducción y de valencia se encuentran separadas por una banda prohibida pequeña en comparación con los materiales aislantes aproximadamente de 1 eV (1.12 eV para *Si* y 0.7 eV para *Ge*). Si se induce una energía en forma de luz o calor con el valor apropiado (dependiendo del material semiconductor) será posible que un electrón de la banda de valencia salte a la banda de conducción [5, 6].

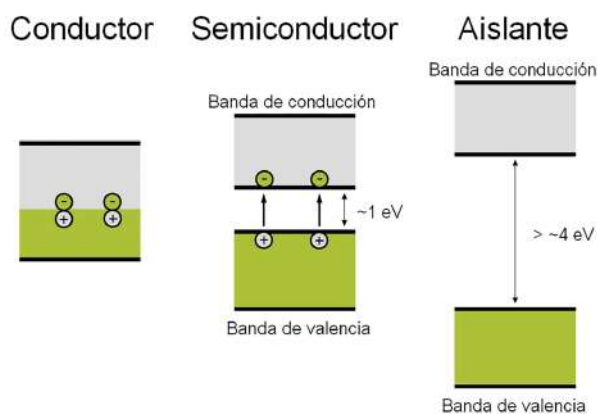


Fig. 1. Diagrama de bandas de energía

Esto está estrechamente relacionado con el transporte de carga en materiales sólidos y de acuerdo a su conductividad se clasifican en:

- Materiales aislantes, cuya resistividad es mayor a  $1 \times 10^{12} \Omega\text{cm}$ , por lo tanto, la conductividad de corriente eléctrica práctica-



mente es despreciable.

- Materiales conductores (generalmente metales) que poseen una conductividad que oscila entre los  $1 \times 10^5$  y  $1 \times 10^6 \text{ S cm}^{-1}$  ( $\Omega^{-1}\text{cm}^{-1}$ ), en consecuencia, pueden conducir una corriente eléctrica sin dificultad.
- Materiales semiconductores, un grupo de materiales de materiales con conductividad  $1 \times 10^{-5} \text{ S cm}^{-1}$ .

#### 4 MATERIALES SEMICONDUCTORES

Los semiconductores son entonces un grupo de materiales que poseen conductividades intermedias entre las de los metales y los aislantes. La característica principal de un semiconductor es la capacidad de conducir o no conducir corriente eléctrica bajo determinadas condiciones de temperatura, excitación óptica o térmica y cantidad de impurezas.

Generalmente, se clasifica como semiconductores a aquellos elementos que se encuentran en el grupo IV de la tabla periódica. También hay semiconductores compuestos, muchos de los cuales están formados a partir de combinaciones especiales de elementos del grupo III-IV y II-VI.

**Table 1.** Algunos materiales semiconductores

Semiconductores Elementales	
Si	Silicio
Ge	Germanio
Semiconductores Compuestos	
AlP	Fosfuro de aluminio
AlAs	Arseniuro de aluminio
GaP	Fosfuro de galio
GaAs	Arseniuro de galio
InP	Fosfuro de indio

La tabla 1 muestra los elementos semiconductores más comunes y algunos semiconductores compuestos. Los semiconductores elementales están compuestos de un solo tipo de átomos tales como

el silicio y el germanio [7].

Los compuestos binarios tales como el arseniuro de galio o el fosfuro de galio son formados a partir de la combinación de elementos de los grupos III y V, siendo el arseniuro de galio uno de los compuestos semiconductores más conocidos; esto se debe a sus buenas propiedades ópticas que lo hacen útil en dispositivos optoelectrónicos. Algunos compuestos formados a partir de los grupos II y VI son:  $ZnS$ ,  $ZnSe$ ,  $ZnTe$ ,  $CdS$ ,  $CdSe$  y  $CdTe$ . También es posible encontrar compuestos semiconductores ternarios y cuaternarios. Un ejemplo es el  $Al_xGa_{1-x}As$ , donde la  $x$  indica la fracción del menor número atómico. Otros ejemplos son:  $GaAsP$  y  $InGaAsP$  [8].

Otra forma de catalogar a los materiales semiconductores es en *intrínsecos* y *extrínsecos*; donde los primeros son materiales puros en los que las concentraciones de electrones y vacancias de electrones disponibles para la conducción eléctrica son idealmente iguales. Respecto a los semiconductores extrínsecos, se forman añadiendo pequeñas cantidades de impurezas a los semiconductores puros con el objetivo de modificar su comportamiento eléctrico alterando la densidad de portadores de carga libre, a estas impurezas añadidas se les denomina **dopantes**. La introducción de dopantes cambia las energías permitidas dentro del material, y dependiendo del tipo de impureza en el dopante logramos que domine la conducción eléctrica debido a electrones o a huecos.

#### 5 SEMICONDUCTORES TIPO P Y N

Cuando se habla de semiconductores extrínsecos, se hace referencia al dopado. Un ejemplo de dopado se muestra en la Fig. 2, en la que se tiene una red cristalina de germanio ( $Ge$ ) y uno de los átomos de  $Ge$  es reemplazado por un átomo de arsénico ( $As$ ). Como se sabe, la configuración electrónica de  $As$  ( $[As] 3d^{10}4s^23p^3$ ) es similar a la del  $Ge$  ( $[Ar] 3d^{10}4s^2$ ); sin embargo, el  $As$

introducido tiene un electrón débilmente ligado que goza de la libertad para moverse por el material, es decir, participa en la conducción eléctrica.

Este proceso da como resultado un semiconductor de *Ge* cuyas propiedades han sido modificadas, ya que el semiconductor formado presenta una mayoría de electrones disponibles, por lo tanto recibe el nombre de: semiconductor tipo *n*. De manera similar, si se realiza el dopado con átomos de indio (*In*), cuya configuración electrónica es  $([Kr] 4d^{10}5s^25p^1)$ , se observará que el *In* carece de un electrón respecto al germanio. Entonces, esta ausencia de electrón en los átomos de *In* produce un efecto como si cargas positivas gozaran de movilidad en el material y participaran en la conducción eléctrica. En este material las corrientes eléctricas son debido a las mencionadas cargas positivas o también llamadas huecos. Un material semiconductor cuya corriente es principalmente debida a huecos se le denomina *semiconductor tipo p* [9, 10].

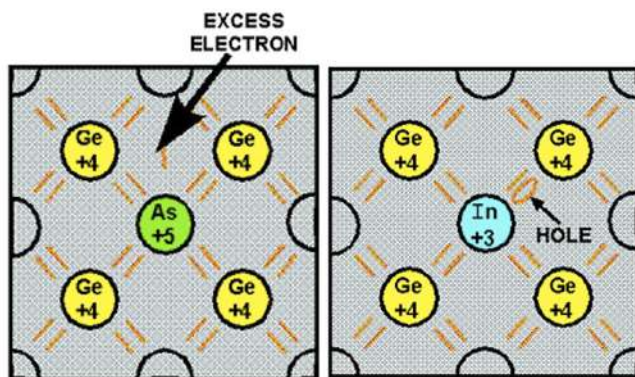


Fig. 2. Red de Germanio en el que un átomo ha sido sustituido por *As* y en la segunda imagen por *In*.

## 6 CONCLUSIONES

La importancia de los materiales semiconductores radica en las propiedades que presentan, ya que pueden aplicarse en diversas áreas, dependiendo de si es un semiconductor tipo *n* o *p*, o si presenta

cierto valor de energía de banda prohibida. Este hecho ha provocado una revolución en el área de la electrónica más que en ninguna otra tecnología, ya que no existe prácticamente ningún circuito, sistema o equipo electrónico moderno que no los utilice. Estos materiales de vanguardia son investigados de forma constante, y los cambios y avances obtenidos impactan en la electrónica; en consecuencia, cada vez se producen dispositivos más miniaturizados.

## REFERENCIAS

- [1]K. N. Shrivastava, *Introduction to quantum Hall Effect*, 1st ed. USA: Nova Science Publishers, Inc., 2002.
- [2]L. Lukasiak and A. Jakubowski, “–,” *Journal of telecommunications and information technology*, vol. 3, no. 1, 2010.
- [3]P. A. Tipler and G. Mosca, *Física: para la ciencia y la tecnología*. España: Editorial Revert, 2005.
- [4]A. Rockett, *The Materials Science of Semiconductor*. USA: Springer, 2008.
- [5]C. Kittel, *Introducción a la física del estado sólido*. Barcelona: Editorial Revert, 2003.
- [6]C. P. Poole and F. J. Owens, *Introducción a la nanotecnología*. Barcelona: Editorial Revert, 2007.
- [7]D. Neamen, *Semiconductor Physics and devices*. USA: McGraw-Hill, 2011.
- [8]M. E. Levinstein and S. L. Rumyantsev, *Properties of advanced semiconductor materials: GaN, AlN, In, BN, SiGe*. Canada: John Wiley and Sons, 2001.
- [9]Internet. Semiconductores.
- [10]L. I. Berger, *Semiconductor Materials*. USA: CRC Press, Inc., 1997.



Ing. Ricardo Bolaños Pérez

Realizó sus estudios en el Instituto Tecnológico de Puebla. Dentro de sus trabajos más sobresalientes, se encuentra el Diseño de un Control Automático de Ganancia para aplicaciones en aparatos de ayuda auditiva, haciendo una implementación analógica y digital en la tecnología de 0.5 um de On-Semiconductor, trabajo con el que obtuvo el grado de Ingeniero. Actualmente se encuentra estudiando la maestría en Dispositivos Semiconductores en la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

Ing. Dalia Téllez Flores

Realizó sus estudios de licenciatura en Ingeniería en Materiales en la FIQ-BUAP. Obtuvo el grado de licenciatura llevando a cabo un proyecto que consistió en la degradación fotocatalítica de colorantes a través de microestructuras de ZnO. Actualmente se encuentra realizando la maestría en Dispositivos Semiconductores en el CIDS-ICUAP.

OFERTA EDUCATIVA

Licenciaturas



Posgrados



BUAP Posgrado en Dispositivos Semiconductores

Convoca a los aspirantes a realizar estudios de

**MAESTRÍA (PNP-CONACYT)**  
**Y**  
**DOCTORADO\***

\* Posgrado PNP - CONACYT

a presentar su solicitud de ingreso en la Coordinación del Posgrado

~MAESTRÍA~ Informes Coordinación del Posgrado

~DOCTORADO~ Recepción de solicitudes en la Coordinación del Posgrado

Mayores informes:	Sede del Posgrado
<b>Coordinador del Posgrado:</b> Dr. Tomás Díaz Becerril todiaz@siu.buap.mx Ext. 7871	14 Sur y Av. San Claudio Col. San Manuel Ciudad Universitaria Edif. 136 Puebla, Pue. 72570
<b>Secretario Académico:</b> Dr. Enrique Rosendo Andrés erosendo@siu.buap.mx Ext. 7850	
<b>Secretaria:</b> Janina Santamaría Velarde js011274@siu.buap.mx Tel/Fax. (222) 229-55-00 Ext. 7876	

## La Aproximación de Hartree - Fock

José Jorge Ríos Ramírez

Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"  
Benemerita Universidad Autónoma de Puebla  
Apartado Postal J-48,  
Puebla, Pue. C.P. 72570 México  
jríos@ifuap.buap.mx

### RESUMEN

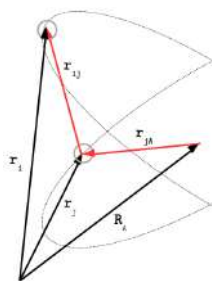


Fig. 1. Sistema de electrones más núcleo

El método Hartree-Fock abrió paso al conjunto de predicciones teóricas determinadas por medio de cálculos numéricos autoconsistentes. Llamados así, cálculos *ab-initio*, dado que solo necesitan como datos de entrada los valores de constantes universales, como el número atómico  $Z$  de cada especie que conforma una molécula. Todas sus variedades conocidas son usadas ampliamente en la actualidad para determinar la energía total del estado base de un sistema de electrones y núcleos atómicos.

### 1 INTRODUCCIÓN

La física moderna conceptualiza la imagen en la cual los electrones (en orbitales moleculares) y núcleos "fijos" se encuentran presentes en átomos,

moléculas y en cualquier estado de agregación de la materia, sin embargo, al no conocerse a un nivel cuántico una solución analítica para un sistema de muchos cuerpos, se acude entonces a las aproximaciones de campo medio como **HF** que han logrado exitosamente acercar sus resultados respecto a mediciones experimentales, consolidándose así como una opción para el análisis de sistemas de electrones interactuantes. El presente artículo busca exponer de manera breve la teoría con el fin de motivar el estudio de este campo de las ciencias, la química cuántica.

Comenzemos a plantear el problema, debemos recordar entonces la representación del átomo propuesta por Niels Bohr donde un conjunto de electrones (representados por cargas puntuales) se traslada al rededor del núcleo como una especie de sistema solar en miniatura. Si utilizamos ejes cartesianos (Ver Figura 1) podremos identificar todos los cuerpos dentro del sistema por medio de vectores de posición:  $\mathbf{R}_A$  para el núcleo en  $A$ ,  $\mathbf{r}_i$  para el electrón  $i$ -ésimo y finalmente unos vectores para establecer la distancia relativa entre dos electrones  $\mathbf{r}_{ij}$  y entre un electrón  $i$  y un átomo  $A$ ,  $\mathbf{R}_{iA}$ .

El objetivo principal entonces será encontrar una solución a la ecuación independiente del tiempo no relativista de Schrödinger:

$$\hat{\mathcal{H}}|\Phi\rangle = \varepsilon|\Phi\rangle \quad (1)$$

Donde  $\hat{\mathcal{H}}$  es el operador Hamiltoniano para el sistema de núcleos y electrones. El cual en unidades atómicas se expresa como [1]:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & -\sum_{i=1}^N \frac{1}{2} \nabla_i^2 - \sum_{A=1}^M \frac{1}{2M_A} \nabla_A^2 \\ & - \sum_{i=1}^N \sum_{A=1}^M \frac{Z_A}{r_{iA}} \\ & + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{1}{r_{ij}} + \sum_{A=1}^M \sum_{B>A}^M \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} \end{aligned} \quad (2)$$

Los primeros dos términos representan la energía cinética de todos los N electrones y de todos los M núcleos,  $\hat{T}_{ee}$  y  $\hat{T}_{nn}$ , el tercero corresponde al potencial de atracción electrostático entre el electrón i-ésimo y el núcleo A-ésimo,  $V_{Ai}$ , los dos últimos términos se relacionan con el potencial de repulsión entre dos electrones y dos núcleos,  $V_{ij}$  y  $V_{AB}$ , donde se superponen todas estas posibles interacciones por pares.

### La aproximación de Born-Oppenheimer

La ecuación diferencial parcial de segundo orden 1 puede separarse en un sistema de dos ecuaciones acopladas si tomamos en cuenta la gran diferencia en el tamaño de las masas entre núcleos y electrones, por lo que una buena aproximación constaría en separar los movimientos de ambas partículas de la función de onda total marcando la dependencia con las coordenadas nucleares,  $R_J$ , en la función de onda electrónica de manera paramétrica.

$$\Phi = \Psi_{nucl}(R_J)\Psi_{elec}(x_i; R_J) \quad (3)$$

Si se reescribe 1 con 2 sustituyendo la definición que hemos hecho de  $\Phi$ :

$$\begin{aligned} & [\hat{T}_{nn}\Psi_{nucl}]\Psi_{elec} + \Psi_{nucl}[\hat{T}_{ee}\Psi_{elec}] \\ & + V_{AB}\Psi_{nucl}\Psi_{elec} + V_{ij}\Psi_{nucl}\Psi_{elec} \\ & + V_{Ai}\Psi_{nucl}\Psi_{elec} = E_{tot}\Psi_{nucl}\Psi_{elec} \end{aligned} \quad (4)$$

Dividiendo entre  $\Phi$ :

$$\frac{\hat{T}_{nn}\Psi_{nucl}}{\Psi_{nucl}} + \frac{\hat{T}_{ee}\Psi_{elec}}{\Psi_{elec}} + V_{AB} + V_{ij} + V_{Ai} = E_{tot} \quad (5)$$

Se puede definir:

$$\begin{aligned} & \frac{\hat{T}_{ee}\Psi_{elec}}{\Psi_{elec}} + V_{ij} + V_{Ai} \equiv E_{elec}(R_J) \\ & (\hat{T}_{ee} + V_{ij} + V_{Ai}) \equiv \hat{\mathcal{H}}_{elec} \end{aligned}$$

Donde:

$$\hat{\mathcal{H}}_{elec}\Psi_{elec}(x_i; R_J) = E_{elec}(R_J)\Psi_{elec}(x_i; R_J) \quad (6)$$

Representa la ecuación electrónica de Schrödinger del sistema, del mismo modo si se sustituye el eigenvalor de energía electrónica en la expresión 5 obtenemos:

$$\hat{T}_{nn} + V_{AB} + E_{elec}(R_J) \equiv \hat{\mathcal{H}}_{nucl}$$

$$\hat{\mathcal{H}}_{nucl}\Psi_{nucl}(R_J) = E_{tot}\Psi_{nucl}(R_J) \quad (7)$$

Donde queda de manera explícita la presencia de un campo efectivo generado por todo el conjunto de electrones actuando sobre los núcleos.

De esta manera podremos resolver la ecuación de Schrödinger electrónica para una posición dada de núcleos  $R_J$  obteniendo  $E_{elec}(R_J)$ , para posteriormente poder construir el Hamiltoniano nuclear y así determinar la energía total  $E_{tot}$  en la ecuación 7, todo en un punto fijo en la geometría de la molécula, cálculo llamado *single point*.

## 2 EL DETERMINANTE DE SLATER Y EL PRINCIPIO DE ANTISIMETRÍA

La función de onda electrónica se escribe en términos de coordenadas de *spin*, es decir como:

$$\Psi_{elec} = \Psi_{elec}(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad (8)$$

Donde:

$$x = \{\mathbf{r}, \omega\} \quad (9)$$

Es la forma de expresar al conjunto de coordenadas espaciales más una coordenada adicional que especifica la etiqueta de *spin* del electrón,  $\alpha$  o  $\beta$ , para *up* o *down* respectivamente. El número cuántico de *spin* electrónico no se encuentra tomado en cuenta dentro del Hamiltoniano, por lo que su inclusión repercute en la forma de  $\Psi$ .

Es una ley de la naturaleza el caracter simétrico o antisimétrico de la función de onda de un conjunto de partículas indistinguibles bajo el intercambio de un par sus coordenadas. Fundamento mejor conocido como principio de exclusión de Pauli, o de antisimetría para el caso de electrones, cuyo efecto se puede representar si usamos la notación para la función de onda electrónica en coordenadas de *spin*:

$$\Psi_{elec}(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = -\Psi_{elec}(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots) \quad (10)$$

Donde se ha intercambiado las coordenadas de *spin* de dos electrones, por acción de un cierto operador de intercambio  $\hat{P}_{i,j}$  y como resultado la función de onda se está multiplicando por un factor  $-1$ .

Es en este punto donde debemos preguntarnos que forma debe de tener una función de onda de

muchos electrones para que cumpla este principio fundamental, una de las maneras más naturales es el producto entre orbitales  $\psi$ , los cuales los entendemos como funciones de onda de un solo electrón, de tal modo que para un sistema con dos electrones  $x_1$  y  $x_2$ , tendremos:

$$\Psi_{1,2}^{elec}(x_1, x_2) = \psi_i(x_1)\psi_j(x_2) \quad (11)$$

O si intercambiamos las coordenadas de *spin* entre los orbitales del producto, conocido como producto de Hartree:

$$\Psi_{2,1}^{elec}(x_1, x_2) = \psi_i(x_2)\psi_j(x_1) \quad (12)$$

Nótese entonces que podemos identificar facilmente donde se encuentra cada electrón si proponemos funciones de onda como 11 y 12.

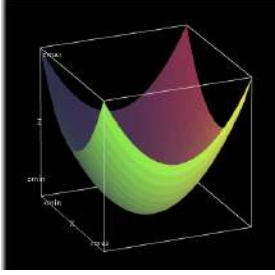
Si deseamos construir la función antisimétrica debemos tomar la combinación lineal apropiada de productos de Hartree.

$$\Psi_{elec}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_i(x_1)\psi_j(x_2) - \psi_j(x_1)\psi_i(x_2)) \quad (13)$$

Esta importante función de onda electrónica recibe el nombre de determinante de Slater y claramente es posible comprobar su carácter antisimétrico si operamos con  $\hat{P}_{1,2}$  para intercambiar las coordenadas  $x_1$  por  $x_2$ :

$$\begin{aligned} \Psi_{elec}(x_1, x_2) &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_i(x_2)\psi_j(x_1) - \psi_j(x_2)\psi_i(x_1)) \\ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_j(x_2)\psi_i(x_1) - \psi_i(x_2)\psi_j(x_1)) \\ &= -\Psi_{elec}(x_2, x_1) \end{aligned}$$

Esta función puede escribirse como un determinante, cuyas filas estan etiquetadas por cada coordenada de *spin* electrónica y las columnas estan etiquetadas por orbital de *spin*, orbital expresado en



**Fig. 2.** Representación de una superficie de energía en un espacio de soluciones dado por el conjunto:  $\{\psi_i\}$ .

coordenadas del tipo 9, por lo que para  $N$ -electrones:

$$\Psi_{elec} = (N!)^{-\frac{1}{2}} \begin{vmatrix} \psi_i(x_1) & \psi_j(x_1) & \cdots & \psi_k(x_1) \\ \psi_i(x_2) & \psi_j(x_2) & \cdots & \psi_k(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_i(x_N) & \psi_j(x_N) & \cdots & \psi_k(x_N) \end{vmatrix} \quad (14)$$

O en notación simplificada:

$$\Psi_{elec}(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = |\psi_i \psi_j \cdots \psi_k\rangle$$

Donde el principio de antisimetría se expresa como:

$$|\cdots \psi_m \cdots \psi_n \cdots\rangle = -|\cdots \psi_n \cdots \psi_m \cdots\rangle$$

### 3 LAS ECUACIONES DE HARTREE-FOCK Y EL OPERADOR DE INTERCAMBIO

La solución de las ecuación 6 se obtiene siguiendo el método variacional, el cual establece que el valor de expectación de la energía para una forma dada de  $\Psi_{elec}$  es un funcional que se escribe como:

$$E_{elec}[\Psi_{elec}] = \langle \Psi_{elec} | \hat{H}_{elec} | \Psi_{elec} \rangle \quad (15)$$

Llamado funcional pues su valor depende de  $\Psi_{elec}$ . Si se cambia el parámetro variacional, la

funcion de Slater  $\Psi_{elec}$ , nos desplazaremos a un nuevo punto en la curva de energía (Ver Figura 2).

$$E[\Psi + \delta\Psi] = \langle \Psi + \delta\Psi | \hat{H} | \Psi + \delta\Psi \rangle$$

Nuestro objetivo es encontrar una forma óptima de la función  $\Psi_{elec}$ , es decir, encontrar un funcional 15 que logre ubicarnos en el mínimo de la superficie de energía. El valor de expectación de  $E[\Psi]$  respecto a una función de Slater aplicada al Hamiltoniano electrónico se escribe como:

$$E[\Psi] = \langle \cdots \psi_i \cdots \psi_j \cdots | \hat{T}_{ee} + V_{Ai} + V_{Aj} | \cdots \psi_i \cdots \psi_j \cdots \rangle \quad (16)$$

Realizando el desarrollo algebraico se llega a un operador que tiene la forma:

$$\hat{F}_j \equiv -\frac{1}{2} \nabla_j^2 - \frac{Z}{R_{Aj}} + \sum_{i \neq j} \langle \psi_i | \frac{1}{r_{12}} | \psi_i \rangle - \sum_{i \neq j} \langle \psi_i | \frac{\hat{P}_{ij}}{r_{12}} | \psi_i \rangle \quad (17)$$

Denominado operador de Fock. Cuya ecuación diferencial se expresa como:

$$\hat{F}_j |\psi_j\rangle = \epsilon_j |\psi_j\rangle \quad (18)$$

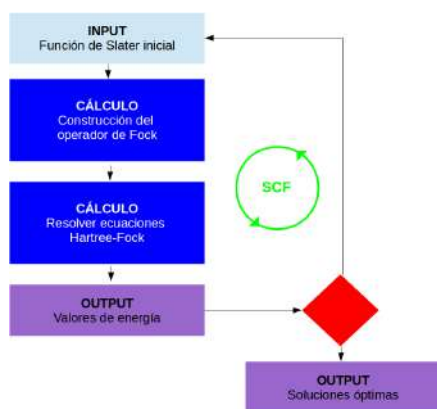
Donde:

$$\hat{J} \equiv \sum_{i \neq j} \langle \psi_i | \frac{1}{r_{12}} | \psi_i \rangle \quad (19)$$

$$\hat{K} \equiv - \sum_{i \neq j} \langle \psi_i | \frac{\hat{P}_{ij}}{r_{12}} | \psi_i \rangle \quad (20)$$

La gran ventaja de la aplicación de este método consiste en que la ecuación 18 se resuelve ahora por medio de un orbital, es decir, por una función de onda de un solo electrón y no por una combinación lineal de ellas (14). Al conjunto de ecuaciones formado por todos los electrones  $x$  del sistema se les llama ecuaciones de Hartree-Fock.

Si aplicamos los operadores de Coulomb  $\hat{J}$  y *exchange*  $\hat{K}$  sobre un orbital  $|\psi_j\rangle$  podemos



**Fig. 3.** Representación de una superficie de energía en un espacio de soluciones dado por el conjunto:  $\{\psi_i\}$ .

notar que en la primera relación simplemente representa un potencial promedio de repulsión electrostático, entre una densidad de carga y un electrón separados por un vector  $r_{12}$ , sin embargo en el término de *exchange* existe un operador que primero intercambia las coordenadas de *spin* entre los orbitales interactuantes y esto nos da a entender una interacción promedio atractiva entre orbitales con diferentes números cuánticos. Que corresponde al enunciado específico del principio de exclusión de Pauli y cuya forma en las ecuaciones de **HF** carece de un símil en la teoría clásica.

#### 4 EL PROCESO AUTOCONSISTENTE

Una vez completado el conjunto de expresiones nos queda implementar un método de solución numérico autoconsistente, ya que como dicta la expresión 18 las funciones de onda de un solo electrón que satisfacen la ecuación se encuentran también dentro del Hamiltoniano en forma de dos potenciales de interacción promedio  $\hat{J}$  y  $\hat{K}$ . En la figura 3, se muestra esquemáticamente las etapas del cálculo para la obtención de las soluciones óptima  $\Psi$  en una posición fija de los núcleos atómicos. Ciclo que implementa todas las expresiones que se han estudiado. El ciclo SCF (*Self Consistent Field*) proporcionará una salida cuando se cumple una condición de convergencia

donde la diferencia de energía entre dos ciclos sea menor a un determinado valor  $\delta$ .

#### 5 CONCLUSIONES

La teoría detrás de los cálculos **HF** junto con los métodos de dinámica molecular y DFT establecen el conjunto de herramientas para estudiar y realizar predicciones teóricas sobre las propiedades de los materiales y apesar de haber sido una idea formulada al rededor de los años treinta hoy en día estos métodos continúan en constante adaptación y perfeccionamiento buscando resolver sistemas con mayores niveles de complejidad.

Este resumen de notas fue recogido de las discusiones realizadas durante el curso optativo: QUÍMICA CUÁNTICA COMPUTACIONAL impartido por el Doctor Juan Francisco Rivas Silva, profesor investigador de tiempo completo del IFUAP.

#### REFERENCIAS

- [1] A. Azabo and N. S. Oslund, *Modern Quantum Chemistry*, 2nd ed. New York: Dover Publications, 1996.



M. en C. José Jorge Ríos Ramírez

Licenciado en Ingeniería Mecánica y Eléctrica de la UIA Puebla. **Egresado del doctorado en ciencias en la especialidad de ciencia de materiales.**



## Grafeno y los materiales bidimensionales

Juan Hernández Tecorralco

Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”

Benemerita Universidad Autónoma de Puebla

Apartado Postal J-48,

Puebla, Pue. C.P. 72570 México

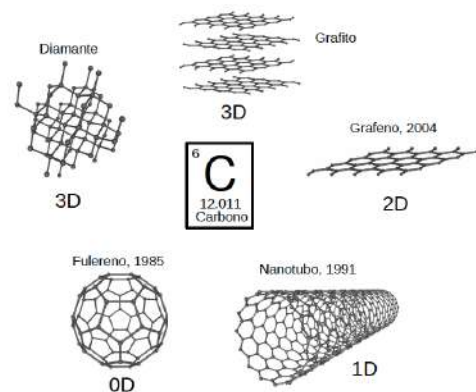
jhdztecocorralco@gmail.com, juanht@ifuap.buap.mx

### RESUMEN

Dentro de los avances científicos y tecnológicos de los últimos años, la búsqueda de novedosas propiedades en la ciencia de materiales ha obligado a la comunidad científica a explorar un nuevo grupo de sistemas cristalinos: los materiales bidimensionales. El grafeno fue el primer material bidimensional descubierto (en el año 2004) a pesar de que se consideraba imposible su existencia. Dentro de sus propiedades más fascinantes está el carácter de sus portadores, electrones y huecos, como partículas relativistas sin masa. En los últimos años se han explorado materiales 2D diferentes del grafeno a base de silicio, germanio, fósforo, nitruro de boro, y dicalcogenuros de metales de transición como candidatos prometedores para diferentes aplicaciones.

### 1 GRAFENO Y SUS PROPIEDADES

Las propiedades de la materia dependen en gran medida de la composición química y de su estructura, es decir, de cómo están ordenados sus átomos en el espacio. Los materiales cristalinos en general son arreglos periódicos de elementos o moléculas en tres dimensiones (3D). Sin embargo, existen otro tipo de cristales que se encuentran



**Fig. 1.** Diferentes alotropos de carbono en 3D, 2D, 1D y 0D. Créditos: Michael Ströck/Wikipedia/CC BY-SA 3.0 (Adaptada).

reducidos dimensionalmente en una, dos o tres de sus direcciones. Un ejemplo claro es el carbono, el cual puede presentar diferentes formas alotrópicas (ver Fig. 1), como el diamante (3D), el grafito (3D), el grafeno (2D), el nanotubo (1D) y los fulerenos (0D).

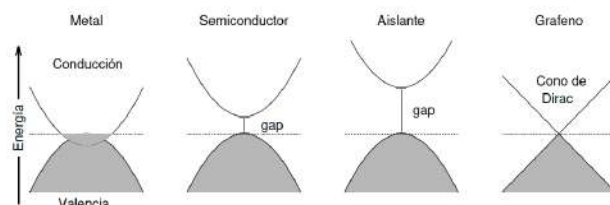
De esta familia del carbono, uno de los más grandes descubrimientos de los últimos años ha sido el grafeno. Este fue el primero de los cristales 2D en descubrirse. El grafeno presenta una estructura plana hexagonal tipo panal de abeja, cuyo espesor es el de un sólo átomo. Fue obtenido en el año 2004 por Andre Geim y Konstantin Novoselov en la Universidad de Manchester en

Reino Unido [1], y gracias a este descubrimiento se harían acreedores seis años después a uno de los máximos galardones dentro de la comunidad científica a nivel internacional: el premio Nobel de Física [2].

Pero, ¿cuál es la importancia de su descubrimiento? Durante años, los científicos aseguraban que la existencia de cristales bidimensionales era imposible. En los años 30's dos físicos teóricos, Peierls y Landau, argumentaban que los materiales 2D eran termodinámicamente inestables [3]. Años después, en 1968, Mermin llegó a la misma conclusión que sus predecesores [4] e incluso existía evidencia experimental que coincidía con los resultados de estos físicos. Así pues, se asumía que los cristales bidimensionales no podrían existir y esto fue una realidad hasta el año 2004.

Sin embargo, la contradicción de su existencia misma no es razón suficiente para hacer énfasis en su importancia, la razón principal son sus propiedades. Para hablar de sus propiedades electrónicas, es decir, aquellas que dependen del comportamiento de sus electrones, es necesario recordar un par de conceptos fundamentales de la física del estado sólido: 1) los electrones en un sólido son responsables en gran medida de muchos de los fenómenos físicos que conocemos, la electricidad, el magnetismo, y la conductividad térmica son algunos ejemplos; y 2) la forma usual de representar su comportamiento es por medio de una estructura de bandas y en general, es compleja.

La estructura de bandas sirve, entre otras muchas cosas, para diferenciar entre tipos de materiales, metales (conductores), semiconductores y aislantes; y permiten describir el rango de energías que tienen permitidas o prohibidas (gap) los electrones en un cristal. En la Fig. 2 se muestran de forma esquemática diferentes estructuras de bandas, incluyendo la del grafeno. Podemos diferenciar dos bandas principales, la de conducción (BC) y la de valencia (BV). Cada banda tiene un tipo



**Fig. 2.** Bandas electrónicas de distintos materiales. Para el grafeno las bandas son lineales y el punto donde se tocan, es el llamado *cono de Dirac*.

de portador, la BV tiene electrones y la BC tiene huecos. En el caso de los metales las BV y BC se cruzan, los electrones de la BV se encuentran en la BC y puede existir corriente eléctrica. En cambio, en los semiconductores y aislantes tenemos una brecha de energía o gap donde los electrones (o huecos) tienen prohibido estar. Dependiendo del gap de energía tenemos semiconductores (típicamente  $\sim 1$  eV) o aislantes ( $> 5$  eV).

En el caso del grafeno, su estructura de bandas corresponde a la de un semimetal debido a que las BV y BC se tocan en un único punto pero no se cruzan (se encuentra en el límite entre un metal y un semiconductor). Este punto se conoce como *cono de Dirac*. Usualmente la estructura de bandas de los materiales presentan una forma parabólica, mientras que en el grafeno es lineal y simétrica. Esta relación le permite a sus portadores comportarse como partículas sin masa conocidas como fermiones de Dirac debido a que obedecen la ecuación de Dirac en el régimen relativista [5, 6].

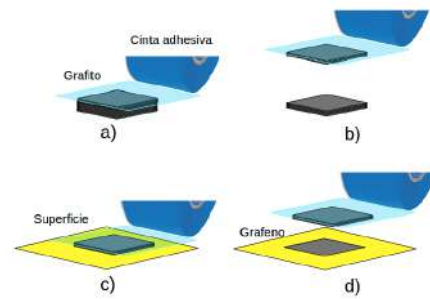
El grafeno, además, es el material más fuerte jamás medido, incluso más que el acero [7]. Es extremadamente liviano, al tener un peso de 0.77 miligramos por metro cuadrado; si tuviera el área del estadio Azteca pesaría apenas 5 gramos. Es relativamente transparente, absorbe sólo el 2.3 % de la luz blanca; presenta alta movilidad de portadores, huecos y electrones, de hasta  $15,000 \text{ cm}^2/\text{Vs}$  a temperatura ambiente,

ideal para dispositivos de respuesta ultrarápida. Además, tiene alta conductividad eléctrica [8] y térmica [9, 10], y la lista sigue.

## 2 GRAFENO EN EL TRAZO DE UN LÁPIZ

Pero, ¿cómo obtener cristales 2D? ¿Qué sofisticados métodos de preparación son necesarios? En el caso del grafeno es muy sencillo, bastaría con tomar un lápiz común y corriente con punta de grafito y escribir tu nombre sobre una hoja de papel. Los trazos dejados pueden contener pequeñas cantidades de grafeno en forma de multicapas o monocapas. Para explicar basta con analizar la relación entre el grafito y el grafeno en la Fig. 1, donde el primero se encuentra formado por varias capas del segundo. En el grafito, las fuerzas que mantienen unidas a dichas capas son las fuerzas de Van Der Waals. Por tanto, la fuerza usada al escribir es suficiente para romper las fuerzas de Van Der Waals, lo que permite separar una o varias capas a la vez, este proceso es conocido como exfoliación mecánica.

Geim y Novoselov obtuvieron el grafeno por un método similar [1]. La técnica usada es conocida como el método de la “cinta adhesiva” (ver Fig. 3), la cual consiste en remover varias capas de grafeno de grafito de alta calidad cristalina con una cinta adhesiva. Después, se coloca la cinta contra una superficie, donde se espera que una monocapa de grafeno quede adherida con suficiente fuerza para ser transferida a dicha superficie al levantar nuevamente la cinta. Este procedimiento es uno de muchos otros más elaborados, pero por su sencillez la exfoliación mecánica es un método efectivo y económico para la obtención de estructuras cristalinas 2D partiendo de materiales 3D. Sin embargo, para que esto sea posible, los materiales 3D deben de poseer una estructura tipo grafito, es decir, estar formadas por capas.

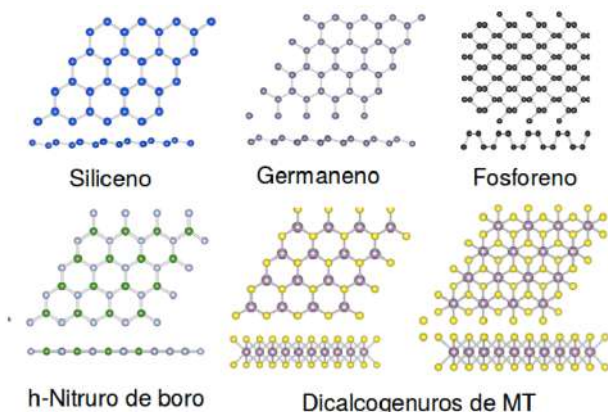


**Fig. 3.** Método de la cinta adhesiva. Se separan del grafito con una cinta adhesiva varias capas de grafeno para después depositarlo sobre una superficie.

## 3 LA FAMILIA DE LOS 2D

Hasta este punto sólo hemos hablado del grafeno pero, ¿qué hay de los otros sistemas 2D? ¿De qué están hechos? ¿Qué tan fácil es obtenerlos? Y ¿qué hay de sus propiedades? Para contestar la primera pregunta basta sólo con mirar la tabla periódica. La comunidad científica analizó la posible existencia de otros cristales bidimensionales a base de elementos cercanos al carbono, por ejemplo, alótropos de silicio, germanio, fósforo, etc; así como la combinaciones de más de un elemento, nitruro de boro, dicalcogenuros de metales de transición, por mencionar algunos. La familia de los materiales 2D ha crecido exponencialmente, por lo que es imposible hacer una extensiva revisión de todos ellos, sin embargo, se presentarán algunos casos representativos como siliceno, germaneno, fosforeno, la monocapa de nitruro de boro hexagonal y la familia de los dicalcogenuros de metales de transición (ver Fig. 4).

**Siliceno y germaneno.** Estos dos cristales bidimensionales son alótropos de silicio y del germanio, elementos que se encuentran en la misma columna que el carbono. Su estructura es hexagonal, como en el grafeno; sin embargo, son dinámicamente inestables en forma plana, por lo que sus átomos presentan distorsión vertical [11]. Del mismo modo, los cálculos teóricos afirman



**Fig. 4.** Vista superior y lateral de siliceno, germaneno, fosforeno, h-BN y dos tipos de dicalcogenuros de metales de transición (MT).

que su estructura de bandas refleja un carácter de semimetal con la presencia de conos de Dirac al igual que en el grafeno.

En el año 2010 fue cuando apareció por primera vez evidencia experimental del siliceno pero, a diferencia de grafeno, no es posible obtenerlo por exfoliación mecánica, si no por otros métodos de crecimiento. Este fue obtenido por deposición sobre una superficie de plata (Ag) [12, 13]. Los científicos observaron que el efecto de la Ag sobre el siliceno modificaba sus propiedades electrónicas, este efecto se observa al determinar su estructura de bandas experimentalmente, ya que sus electrones pierden el carácter de fermiones de Dirac, así como los conos de Dirac. En el caso del germaneno se ha obtenido experimentalmente sobre una superficie de oro (Au).

En el área de la electrónica ha sido posible la implementación del siliceno en un transistor de efecto de campo con transporte de carga ambipolar, de huecos y electrones, pero con una movilidad menor de portadores  $\sim 100 \text{ cm}^2/Vs$  [14].

**Fosforeno.** El fósforo posee, al igual que el

carbono, varias formas alotrópicas, como son el fósforo rojo, el blanco y el negro. Este último alótropo presenta una estructura del tipo gráfitica, es decir, está formada por capas, lo cual lo hace un candidato idóneo para usar la exfoliación mecánica. A una monocapa de fósforo negro se le conoce como fosforeno, el cual fue obtenido en el año 2014 [15, 16]. Este material bidimensional es un semiconductor con estructura hexagonal pero no plana.

Para su aplicación tecnológica en el área de la electrónica, el fosforeno es un fuerte candidato en comparación al grafeno, debido a que su gap varía entre  $0.8 - 1.5 \text{ eV}$  de acuerdo al número de capas. Además, posee también una alta movilidad de electrones, entre  $400 - 4000 \text{ cm}^2/Vs$  [17]. Gracias a estas características, el fosforeno es un candidato ideal para construir transistores de efecto de campo o como foto-detectores.

**Nitruro de boro hexagonal.** El nitruro de boro en su forma hexagonal (h-BN), también conocido como “grafito blanco”, es una sustancia química compuesta de átomos de boro y nitrógeno. De este cristal es posible aislar una monocapa de h-BN por medio del método de la cinta adhesiva.

Esta monocapa, al igual que el grafeno, es completamente plana con una geometría tipo panal de abejas. Sin embargo, en comparación a otros cristales 2D su estructura de bandas es la de un aislante con un gap de energía de  $5.9\text{ eV}$ .

**Dicalcogenuros de metales de transición.** Otra familia de materiales 2D son las monocapas de dicalcogenuros de metales de transición (TMD's) y pueden ser obtenidos por exfoliación mecánica. Su fórmula química es del tipo  $MX_2$ , donde  $M$  es un metal de transición como molibdeno (Mo) o tungsteno (W), y  $X$  un calcógeno como azufre (S), selenio (Se) o telurio (Te). Este cristal 2D es un sándwich entre el metal y dos calcógenos. Estos pueden tener dos tipos de estructuras, una trigonal prismática u octaedral.

Dependiendo de la coordinación y del estado de oxidación del metal pueden tener carácter de semiconductores ( $MoS_2, WS_2$ ), semimetales ( $WTe_2, TiSe_2$ ), metales ( $NbS_2, VSe_2$ ) y superconductores ( $NbSe_2, TaS_2$ ) [18].

#### 4 PERSPECTIVAS

El descubrimiento del grafeno ha sido uno de los más grandes hallazgos de los últimos años. Gracias a él, se abrió un nuevo campo de estudio dedicado a investigar los materiales 2D. Hasta la fecha han sido publicados un poco más de 191,000 artículos con el tema de grafeno, de los cuales, en 2017 fueron publicados alrededor de 43,000 y en lo que va del año ya van arriba de 10,000 [19]. El universo de aplicaciones y nuevos fenómenos en grafeno y otros materiales 2D está limitado solamente por la imaginación humana. Es por ello que la comunidad científica avanza a pasos agigantados en esta área, estudiando miles de nuevos materiales con miles de nuevas propiedades.

El objetivo de este artículo era sólo mostrar de forma breve el panorama de esta área de estudio de acuerdo al entendimiento del autor, así como hacer énfasis en la importancia y el alcance de los cristales bidimensionales.

#### REFERENCIAS

- [1]K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigorieva, and A. A. Firsov, "Electric field effect in atomically thin carbon films," *Science*, vol. 306, no. 5696, pp. 666 – 669, 2004.
- [2]K. S. Novoselov, "Graphene: Materials in the atland (nobel lecture)," *Angewandte Chemie International Edition*, vol. 50, no. 31, pp. 6986 – 7002, 2011.
- [3]R. Pierls, "Quelques propriétés typiques des corps solides," *Annales de l'institut Henri Poincaré*, vol. 5, no. 3, pp. 177 – 222, 1935.
- [4]L. D. Landau, "Zur theorie der phasenumwandlungen ii," *Phys. Z. Sowje-tunion*, vol. 11, pp. 26 – 35, 1937.
- [5]N. D. Mermin, "Crystalline order in two dimensions," *Phys. Rev.*, vol. 176, pp. 250 – 254, December 1968.
- [6]A. K. Geim and K. S. Novoselov, "The rise of graphene," *Nature Materials*, vol. 6, pp. 183 – 191, 2007.
- [7]K. S. N. et al., "Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene," *Nature*, vol. 438, pp. 197 – 200, 2005.
- [8]C. Lee, X. Wei, J. W. Kysar, and J. Hone., "Measurement of the elastic properties and intrinsic strength of monolayer graphene." *Science*, vol. 321, no. 5887, pp. 385 – 388, 2008.
- [9]I. M. et al., "Current saturation in zero-bandgap, top-gated graphene field-effect transistor," *Nat. Nanotechnol.*, vol. 3, pp. 654 – 659, 2008.
- [10]A. A. B. et al., "Superior thermal conductivity of single-layer graphene," *Nano Letters*, vol. 8, pp. 902 – 907, 2008.
- [11]S. Cahangirov and et al., "Two- and one-dimensional honeycomb structures of silicon and germanium," *Phys. Rev. Lett.*, vol. 102, p. 236804, 2009.
- [12]B. Lalmi, H. Oughaddou, H. Enriquez, A. Kara, S. Vizzini, B. Ealet, and B. Aufray,

- “Epitaxial growth of a silicene sheet,” *Applied Physics Letters*, vol. 97, no. 22, p. 223109, 2010.
- [13]B. Aufray and et al., “Graphene-like silicon nanoribbons on *ag*(110): A possible formation of silicene,” *Applied Physics Letters*, vol. 96, no. 18, p. 183102, 2010.
- [14]M. E. Dávila, L. Xian, S. Cahangirov, A. Rubio, and G. L. Lay, “Germanene: a novel two-dimensional germanium allotrope akin to graphene and silicene,” *New Journal of Physics*, vol. 16, no. 9, p. 095002, 2014.
- [15]L. Li and et al., “Black phosphorus eld-eect transistors,” *Nat. Nanotechnol.*, vol. 9, pp. 372 – 377, 2014.
- [16]S. P. Koenig and et al., “Electric field effect in ultrathin black phosphorus,” *Applied Physics Letters*, vol. 104, p. 103106, 2014.
- [17]A. Carvalho and et al., “Phosphorene: from theory to applications,” *Nature Rev. Mat.*, vol. 1, p. 16061, 2016.
- [18]M. Zeng, Y. Xiao, J. Liu, K. Yang, and L. Fu, “Exploring two-dimensional materials toward the next-generation circuits: From monomer design to assembly control,” *Chemical Reviews*, vol. 0, no. 0, 0. [19](2018, Abril). [Online]. Available: <http://apps.webofknowledge.com>.



M. en C. Juan Hernández Tecorralco

Estudiante del doctorado en ciencias en la especialidad de ciencia de materiales.

## La Marcha por la Ciencia

Diana del Carmen Rojas Ciofalo

Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"  
Benemerita Universidad Autónoma de Puebla  
drojas@ifuap.buap.mx



El pasado 14 de abril se celebró en la ciudad de México, y en otras ciudades del país y del mundo, la segunda edición de la Marcha por la Ciencia; un acto público pocas veces visto, en donde tanto estudiantes como investigadores, docentes, divulgadores de la ciencia y personas que apoyan la educación y la ciencia salieron a las calles a protestar contra las políticas públicas que afectan el desarrollo de las actividades de investigación. La convocatoria a la primera Marcha por la Ciencia comenzó en Washington D.C. como respuesta a las políticas anticientíficas del presidente Donald Trump, como retirarse del Acuerdo de París contra el cambio climático [1]. Desde el anuncio de la primera edición en 2017, en México fue bienvenida la invitación de unirse a esta protesta en la cual se abría la oportunidad de mostrar el descontento debido a los recortes que hubo en el rubro de ciencia ese año [2] y que, entre

otras cosas, tuvo como consecuencia que los pagos de las becas de posgrado pasaran de estar basadas en el salario mínimo a UMA (Unidad de Medida y Actualización).

México es partícipe en varias organizaciones y convenios mundiales en donde se ha comprometido a fortalecerse en el ámbito científico, sin embargo no se está cumpliendo con esta misión. Podemos destacar los siguientes:

- Siendo México miembro de la OCDE (Organización para la Cooperación y el Desarrollo Económico) continuamente se compara la inversión que se hace en ciencia y tecnología con la de los otros países asociados. En este rubro el país ocupa los últimos lugares, el promedio de la OCDE es una inversión del 2.5% del Producto Interno Bruto (PIB) [3] y la de México es de 0.51%. Cabe destacar que desde inicios de este último sexenio se incorporó en el Plan de Desarrollo 2013-2018 el compromiso de que México subiría la inversión en Ciencia y Tecnología hasta llegar al 1% del PIB, meta que no se cumplió.
- En junio de 2017 México reafirmó su apoyo y compromiso con el Acuerdo de París contra el cambio climático [4]. En general el papel de México en relación al cambio climático ha sido correcto, sin embargo hay dos premisas del Acuerdo en las que se ha fallado. En el artículo 9 se establece que

es necesario asegurar los recursos financieros suficientes para atender las obligaciones de los países en esta materia y en el artículo 13 se decreta que las medidas adoptadas para hacer frente al cambio climático deben ser claras, proporcionando los marcos claros contra la corrupción. Contrario a lo que se firma, en 2017 el dinero destinado en específico a cambio climático se recortó en 21% [5], además de que no se han establecido mecanismos de transparencia del presupuesto.

- Debido a las movilizaciones a nivel mundial el 30 de octubre de 2017 la UNESCO, en su sesión 39 [6], retomó el hecho de que conforme a la Declaración Universal de los Derechos Humanos [7], en particular el artículo 27.1, se establece que toda persona tiene derecho a gozar y participar en el progreso científico y de los beneficios que de éste resulten. En la sesión mencionada se renovaron y modificaron algunas recomendaciones sobre ciencia, en particular que se debe garantizar la protección, reconocimiento, entrenamiento, derechos y obligaciones de todo el personal científico, que incluye a investigadores, docentes, administrativos, técnicos y estudiantes.

Como se puede ver, está en la ley, y en los acuerdos y convenios que ha firmado el país, el compromiso de fortalecer a su sector científico, por lo tanto, se tienen los medios para presionar por el cumplimiento de lo establecido en ellos. ¿Quién lo va a hacer? ¿Quién va a llamar la atención de los gobernantes para que lleven a cabo estas acciones? Somos los científicos quienes tenemos la responsabilidad de hacer valer estos acuerdos. Al día de hoy estamos en un estancamiento porque gran parte del sector científico ha decidido ser apolítico, y a la vez el político profesional no tiene una inclinación por la cultura científica.

El panorama hoy en día es grave. Con el cambio del monto de becas de posgrado basadas en salarios mínimos a UMAs, en unos años el pago mensual será muy poco atractivo para incorporarse a un programa de posgrado. Además ya son dos años en que el CONACyT (Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología) comienza a pagar las becas con un retraso de al menos un semestre. Si tomamos en cuenta que se pide dedicación exclusiva y sumando que ahora cada posgrado (de los PNPC) ofrece un número limitado de becas, provocará que quienes no puedan tener apoyo financiero extraordinario de sus familias, éstos queden fuera de la opción de hacer un posgrado, incluyendo las ciencias; perdiendo así a personas que tienen mucho para aportar a la ciencia en este país. También, por primera vez un centro público de investigación estalló en huelga, sucedió en Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE) el 30 de mayo; y otros tres centros, CIESAS, COLEF y CICESE también tienen problemas salariales, y han sido presionados con emplazamientos a huelga. Y hay más, en general las universidades públicas de los estados viven una crisis de presupuesto que pone en entredicho su existencia, entre ellas las de Morelos, Veracruz, Durango, Yucatán, Nayarit, Oaxaca, Guerrero y Coahuila.

Como mexicanos, nosotros mismos nos aplaudimos que una de nuestras mejores características es que somos buenos para improvisar, para algunos será familiar la historia de algún mexicano colaborando con extranjeros que durante una situación imprevista brilló precisamente por esta capacidad de improvisación. Y un gran ejemplo fue el reciente temblor en septiembre, hubo auto-organización de la sociedad, mucha colaboración para salir del problema. Pero no logramos mantener esta organización para proyectos de largo plazo, una y otra vez las distintas organizaciones civiles tienden a la desaparición. Por eso es importante que haya repetición de la Marcha por la Ciencia, un día dedicado



a replantearnos si estamos tomando nuestra responsabilidad como científicos, si estamos logrando que las políticas públicas se basen en hechos científicos, si estamos dejando que la pseudociencia tenga un alcance mayor en la población y si esto conduce a una situación de riesgo en la salud pública.

La presente administración del país pretendió aprobar al vapor la nueva Ley de Ciencia y Tecnología, en la que se proponía un diseño a largo plazo para el desarrollo en este rubro. El problema es que no se consultó a la comunidad científica para hacer las modificaciones pertinentes a esta ley. Gran parte de la comunidad científica aún no se ha enterado de esta propuesta, y también es grave que la palabra estudiante ni aparece en dicho documento. Ya es momento de que estudiantes, investigadores, divulgadores y todo trabajador del área científica asumamos nuestra responsabilidad y pugnemos por una política basada en ciencia y por una ciencia llevada a cabo con buenas políticas; indignémonos por el hecho de que en la presente batalla electoral los discursos y plataformas de los contendientes no tienen menciones profundas de los temas educativos y científicos. De nosotros depende que nuestros políticos entiendan que los países ricos no invierten mucho en ciencia por ser ricos, son ricos porque invirtieron en ciencia.

La autora agradece a Edgar Vargas por la asesoría en la elaboración de esta nota.

*Nota 1:* Recomiendo la lectura de los artículos de Cienciorama; “¿Es cinco menor a uno?” (<http://cienciorama.unam.mx/#!titulo/558/?-es-cinco-menor-a-uno>) y ¿Recortes a la ciencia? Su divulgación como respuesta necesaria (<https://bit.ly/2o0swSD>). También la noticia en Cienciorama: “Va la marcha de los científicos en EU ¿y en México?” (<https://bit.ly-/2sXIH8z>)

*Nota 2:* Ciudades que también participaron en la Marcha por la Ciencia: San Luis Potosí, Ensenada, Irapuato,

Guadalajara, Morelia, Cuernavaca y Villahermosa.

*Nota 3:* Gran parte de la información aquí vertida la conocí por los comunicados y pronunciamientos de la “Marcha por la Ciencia México” y del “Movimiento por la Ciencia Ciudad de México”.

## REFERENCIAS

- [1](2018, Mayo). [Online]. Available: <https://bit.ly/2qFUg0p>
- [2](2018, Mayo). [Online]. Available: <https://bit.ly/2JxGQNw>, <https://bit.ly/2Mjl4Px>
- [3](2018, Mayo). [Online]. Available: <https://datos.bancomundial.org/indicador>
- [4](2018, Mayo). [Online]. Available: <https://www.gob.mx/inecc/articulos/mexico-reafirma-su-apoyo-y-compromiso-con-el-acuerdo-de-paris-para-detener-los-efectos-del-cambio-climatico-global-110277?idiom=es>
- [5](2018, Mayo). [Online]. Available: <https://www.tm.org.mx/>
- [6](2018, Mayo). [Online]. Available: <https://bit.ly/2kUeLVO>
- [7]N. Unidas, *Declaración universal de los derechos humanos*. Naciones Unidas, 2015.



M. en C. Diana del Carmen Rojas  
Ciofalo

**Estudiante del doctorado en ciencias en la  
especialidad de Física.**

## Stephen Hawking

1942-2018

«Me sorprende el desinterés acerca de cosas como la física, el espacio, el universo y la filosofía de nuestra existencia, nuestro propósito, nuestro destino final. Es un mundo loco. Sé curioso»

*En la imagen de la contraportada*, el autor de la obra explora la teoría del color; busca aprender más sobre perspectivas monocromáticas, en su análisis del color indaga con la ausencia de dos de los colores primarios, algo que en cierta forma atañe a la física. El artista se ha preguntado sobre la posibilidad de que en algún universo toda la idea de color se reduzca a una percepción monocromática y por ello no es difícil entender que se haya inspirado en la figura de Stephen Hawking, su último trabajo versa sobre la posibilidad de detectar los llamados multiversos, la idea en sí extraña, exótica, pero posible en el contexto de ciertas teorías sobre la estructura del universo a partir del Big Bang [1].

La pequeña pintura muestra otros aspectos inherentes a la vida de Hawking; es muy conocido que padecía esclerosis lateral amiotrófica (ELA), enfermedad que le fue diagnosticada cuando contaba con 21 años, la misma que por décadas lo confinó a la casi inseparable silla de ruedas y el sintetizador de voz. Muchas ocasiones expresó que, si bien tuvo la “suerte” de padecer ELA, fue un hombre afortunado y pudo dedicarse a estudiar el universo a gran escala, enigma que siempre le motivó [2]. La superación a la esclerosis y sus actividades de divulgación iniciadas principalmente con la publicación en 1984 del libro “Breve Historia del Tiempo”, le hicieron conocido en muchas partes del mundo, volviéndolo una figura mediática, al grado de ser considerado un icono de la cultura pop: era entrevistado en matutinos de TV o bien aparecía en series populares (Star Trek, los Simpson, etc.).

Pero no siempre llevó bien la fama, como contaría su exesposa Jane Wilde [3]; sin embargo,

muchas veces admitió estos errores. Esto es sin duda una enseñanza valiosa, pues en más de una ocasión aceptó sus yerros y siempre agradeció a Jane su apoyo. También empleó su fama para diversos fines como promover una mayor responsabilidad social; incluso en alguna ocasión fue invitado para hablar sobre la depresión: «El mensaje de esta charla es que los agujeros negros no son tan negros como los pintan. No son prisiones eternas como alguna vez se pensó. Las cosas pueden salirse de un agujero negro desde ambos lados y posiblemente hacia otro universo. Entonces, si te sientes en un agujero negro, no te rindas: hay una salida» [4].

Era también consciente de la necesidad de mejorar nuestro trato con la naturaleza que nos rodea: «Estamos en peligro de destruirnos a nosotros mismos por nuestra codicia y estupidez. No podemos quedarnos mirando sólo hacia nosotros en un planeta pequeño y cada vez más contaminado y superpoblado». Como hemos mencionado, aunque era conocido entre el gran público, en parte por su lucha constante contra la esclerosis, y su fama se reanimó en años recientes por la película “La teoría del todo” (en donde se expone parte de su vida), no obstante, su legado científico es en realidad desconocido fuera de la comunidad académica, sus investigaciones son altamente técnicas matemáticamente hablando. Con todo, Hawking siempre intentó hacer partícipe a toda la comunidad no científica de los avances en cosmología y física: «Si la gente no sabe qué hacen los científicos, no apoyará a la ciencia y eso será un desastre para la humanidad» [5].

Su notoriedad académica inició en la década de los 70’s cuando Hawking encontró que la mecáni-

ca cuántica implicaba que los agujeros negros eran objetos que emitían un tipo radiación, hoy llamada “radiación de Hawking” [6, 7]. Este trabajo sugirió nuevas ideas y enfoques, desde cuestionar con más profundidad cuáles son los efectos cuánticos en un agujero negro y si es posible formular la gravedad cuántica desde ello; también cuestiones como qué sucede a la información al caer en un agujero negro y la forma en cómo se procesa la información dentro de un objeto de este tipo, el cual es aún hoy en día una pregunta abierta [8].

Siguiendo con la imagen, ésta aún nos muestra más, como su mejilla. Al final de su vida, sólo podía controlar de forma voluntaria un leve movimiento en su mejilla. Junto, se nota una pequeña sonrisa, símbolo de su ya mítico sentido del humor, solía decir «La vida sería trágica, si no fuera graciosa». A lo largo de su carrera como físico, desarrolló principalmente sus investigaciones en el estudio de los agujeros negros y la formación y destino final del universo. Se mantuvo casi siempre a la vanguardia de los nuevos descubrimientos, cierto que no siempre compartía las nuevas ideas, por ejemplo, no era entusiasta respecto al bosón de Higgs (detectado en 2012). Pero otra vez, muchas veces aceptó su error y rectificó. Los cálculos, investigaciones e ideas de Stephen Hawking siguen siendo exploradas por diversos grupos de físicos teóricos a lo largo del mundo, muchas seguirán resistiendo el paso del tiempo y otras tendrán que ser modificadas; el conocimiento se construye sobre las bases que resisten las pruebas empíricas, y Hawking ha legado las bases para seguir construyendo en la gran búsqueda por entender los secretos de la naturaleza [8]. Quizá la pregunta más inquietante que Hawking deja abierta a las generaciones venideras es: ¿cuál es el propósito del universo?.

## REFERENCIAS

[1] S. W. Hawking, T. Hertog, *A Smooth Exit from Eternal Inflation?*, 2018, arXiv:1707.07702.

- [2] J. P. McEvoy, O. Zarate, *Stephen Hawking para principiantes*, Errepar, Argentina, 1997.
- [3] I. M. Rodrigo, *Entrevista a Jane Wilde*, 2015, <http://www.abc.es/cultura/libros/20150121/abc-jane-sthephen-hawking-201501201850.html>, visto 01/04/2018.
- [4] E. Sánchez, *El hermoso mensaje de Stephen Hawking contra la depresión*, 2018, <https://lamenteesmaravillosa.com/hermoso-mensaje-stephen-hawking-la-depresion/>, visto 01/04/2018.
- [5] C. Sáez *Entrevista a C. Galfard*, 2018, Visto 01/04/2018.
- [6] S. W. Hawking *Particle creation by black holes*, *Comm. Math. Phys.* Volume 43, Number 3, 1975.
- [7] S. W. Hawking, *Black holes and thermodynamics*, *Phys. Rev. D* 13, 191, 1976.
- [8] VV. AA., *El legado de Stephen Hawking*, Ciencia y Desarrollo (Scientific American en español), 2018.



M. en C. Alexander Joan Cristo Juárez Domínguez

Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”,  
Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.  
E-mail: [ajuarez@ifuap.buap.mx](mailto:ajuarez@ifuap.buap.mx).

**Estudiante del doctorado en ciencias en Física.**



Leonardo  
June 3 2018



**BUAP**



*Estudiantil*

Te invita a participar

El comité editorial recibe tus propuestas para el siguiente número:

Artículos  
Reseñas  
Foto de portada  
Ilustraciones

Escríbenos a:

**[conciencia.buap@gmail.com](mailto:conciencia.buap@gmail.com)**

y envíanos tus comentarios,  
sugerencias y aportaciones.