PARTICIPANTES
(en orden de aparición)

1. Manuel May Alarcón (INAOE)
2. Luis Zamora Peredo (IICO-UASLP)
3. Francisco Flores García (CIDS-ICUAP)
4. Nadia Saucedo Zeni (IICO-UASLP)
5. Guillermo Jiménez de los Santos (CIDS-ICUAP)
6. Alejandro Bautista Hernández (IFUAP)
7. Juan Francisco Tlapanco (IFUAP)
8. Eliud Basilio Ibarra (IFUAP)
9. José Alberto Luna López (CIDS-ICUAP)
10. Carolina Romero Salazar (IFUAP)
11. Sergio Román López (IFUAP)
12. Héctor Pérez Ladrón de Guevara (IICO-UASLP)
13. Irving Paul Vargas Cruz (IICO-UASLP)
14. Selina Ponce Castañeda (UASLP)
15. Joel Ernesto Montaño Rivas (IICO-UASLP)
16. Aurelio Támez (UAEMEX)
17. José Antonio Moreno Razo (UAMI)
18. Xóchitl López Lozano (IFUAP)
19. Adán Luna Flores (CIDS-ICUAP)
20. Omar A. Hernández Flores (IFUAP)
21. Gustavo Orellana Rivadeneyra (IFUAP)
22. Nicolás Atenco Analco (IFUAP)
23. Fernando Luis Pérez Sánchez (IFUAP)
24. Ernesto Chigo Anota (IFUAP)
25. Mirna López Fuentes (IFUAP)
26. Jorge Mulia (UAEMEX)
27. Benito Flores Desirena (IFUAP)
28. María Elena Hernández Torres (IFUAP)
29. Luis René Sagredo Hernández (UAZ)
30. Ariadna Sánchez Castillo (IFUAP)
31. María Luisa García Betancourt (CREN, UAZ)
32. Víctor Dossetti Romero (IFUAP)
33. José Antonio Méndez Bermúdez (IFUAP)
34. José Alberto Armendáriz Cruz (ESFM-IPN)
35. Daniel Osorio González (UAEMEX)
36. María Luisa Roxana Licona (FCQ-BUAP)
37. Jorge Cotzomi Paleta (IFUAP)
38. Briseida Meneses Alviso (IFUAP)
39. Alberto Canizo Cabrera (IFUAP)
40. Neftalí Pérez Amaro (IFUAP)
41. Maria de los Angeles Pérez Azcona (IFUAP)

P1

Sensor láser con rejillas de Bragg interrogado por la frecuencia de espaciamiento intermodal

M. May Alarcón, E.A. Kuzin, R.A. Vázquez Sánchez.
Instituto Nacional de Astrofísica Óptica y Electrónica (INAOE)
Apartado postal 51 y 216, C.P. 72000 Puebla, Pue; México

Investigamos la frecuencia de espaciamiento intermodal a la salida de un láser. La cavidad láser es formada por una rejilla de Bragg de referencia, una fibra dopada con erbio, una fibra estándar de 8.66 Km y varias rejillas usadas como sensores. En condiciones normales, la rejilla de referencia tiene su longitud de onda de reflexión mayor que la de las rejillas usadas como sensores. Cuando las rejillas sensores son estiradas una generación láser es llevada a cabo, estas rejillas pueden tener la misma longitud de onda de reflexión entre ellas pero inferior a la de referencia. Cada rejilla estirada es identificada porque cada una de ellas está colocada a una distancia específica de la rejilla de referencia. La técnica de interrogación por medio del espaciamiento de modos consiste en medir la frecuencia intermodal generada entre la rejilla sensor y la de referencia con un analizador de radio frecuencia. Con cavidades tan largas como 8.66 Km podemos esperar frecuencias de espaciamiento intermodal del orden de decenas de kilohertz. Una separación de 23 m entre rejillas sensoras es determinada por el ancho de banda de la frecuencia intermodal. Un ancho de banda de 250 Hz fue encontrado experimentalmente. Con esta técnica podemos medir tensión o temperatura sobre las rejillas de Bragg colocadas en lugares remotos con una mínima distancia de fibra estándar entre ellas.

P2

Crecimiento y caracterización de heteroestructuras AlGaAs/GaAs utilizadas en patrones de resistencia electrica basados en el efecto Hall cuántico

L. Zamora-Peredo, N. Saucedo-Zeni, A. Lastras-Martínez, y V. H. Méndez-García
Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Karakorum 1470, Lomas 4ª Sección, San Luis Potosí, S.L.P., México 78210.
Tel. (444) 8 25 01 83.

En este trabajo se reporta el avance alcanzado en la optimización de heteroestructuras AlGaAs/GaAs que contienen un gas bidimensional de electrones (2DEG, del ingles: *2 two dimensional electrón gas*) de alta movilidad las cuales son ampliamente utilizadas como patrones

estándar de resistencia eléctrica, puesto que tienen la estructura apropiada para presentar el efecto Hall cuántico (QHE, del ingles: *quantum Hall effect*). El QHE se ha encontrado invariable a parámetros externos como por ejemplo la presión, la humedad y el tiempo, por lo que, el estudio de heteroestructuras que presenten el QHE es de gran importancia en Metrología.
Para la observación del QHE se requiere excelente calidad cristalina en las heteroestructuras, por lo que es necesario emplear técnicas sofisticadas de crecimiento como por ejemplo Epitaxia por Haces Moleculares (MBE, del ingles: *molecular beam epitaxy*). Mediante MBE es posible tener preciso control sobre los parámetros de crecimiento asegurando un gran nivel de reproducibilidad; además, el ambiente de ultra alto vacío permite sintetizar materiales de muy buena calidad cristalina.
Las estructuras crecidas y estudiadas en este trabajo son heteroestructuras AlGaAs/GaAs con dopaje modulado, donde se pone en contacto n-AlGaAs y GaAs para formar un 2DEG justo en la interface de esta heterounión. La movilidad de los electrones que forman este gas es limitada por los efectos de dispersión causados por la interacción coulombiana que experimentan los electrones del gas y las impurezas ionizadas de la barrera (n-AlGaAs). Para esto se utilizó la técnica de dopaje modulado, la cual consiste en crecer una capa espaciadora de algunos cuantos Angströms de AlGaAs sin dopar después del GaAs para alejar del 2DEG los donadores ionizados que están en el AlGaAs, esto disminuye los efectos de dispersión y modula la difusión de los electrones de la barrera hacia el canal de conducción.
En este trabajo reportamos el estudio de heteroestructuras AlGaAs/GaAs con diferente espesores de la capa espaciadora, las cuales fueron caracterizadas mediante fotorreflectancia y mediciones Hall.

P3

Estudio de peliculas SRO y su potencial uso como sensores de radiación

F. Flores Gracia, M. Aceves, J. Carrillo, C. Falcony C. Domínguez P.I.
CIDS-ICUAP

Se presentan resultados finales de tesis de Doctorado sobre estudios de fotoluminiscencia, catodoluminiscencia y fotoluminiscencia con aplicación de voltaje de polarización en películas de óxido de silicio enriquecido con silicio (SRO). Las películas fueron obtenidas por implantación de silicio en óxido de silicio, por depósito PECVD y LPCVD y también se obtuvieron películas super enriquecidas por implantación de silicio en películas obtenidas por PECVD y LPCVD en las que ya había exceso de silicio.
Con la aplicación de voltaje de polarización se encuentran corrimientos en las bandas de fotoluminiscencia. Se encuentra que las máximas emisiones de luz y corrimientos en las bandas de fotoluminiscencia corresponden al rango entre 4% y 10% de exceso de silicio. Los resultados obtenidos nos llevan a proponer un modelo para explicar la emisión de luz en estos materiales y la posibilidad de usarlos como sensores sintonizables de radiación.

P4

Crecimiento y caracterización de puntos cuánticos de InAs sobre submonocapas de Si en GaAs (100)

N. Saucedo-Zeni, L. Zamora, A. Lastras-Martínez, C. I. Medel-Ruiz, V. H. Méndez-García.
Instituto de Investigación en Comunicación Óptica, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Karakorum 1470, Lomas 4ª. Sección, San Luis Potosí, S.L.P., México 78210.

En este trabajo investigamos los efectos inducidos por el Si en la formación de puntos cuánticos autoensamblados (QDs) de InAs crecidos por epitaxia de haces moleculares sobre substratos de GaAs (100). Previo a la deposición del InAs la superficie del GaAs es expuesta a un flujo molecular de Si. El tiempo de exposición es de algunos segundos por lo que se estiman espesores de Si menores a una monocapa (submonocapas de Si). La idea detrás de esto es inducir una mayor tensión en las capas de InAs por depositar, con lo cual se esperarían cambios en el autoensamble de los puntos cuánticos. Además el estado químico de la interfaz InAs/GaAs puede verse modificado con la presencia de átomos del grupo IV.

La técnica de reflexión de electrones difractados de alta energía fue utilizada para caracterizar *in-situ* los procesos en la superficie de las muestras. Ésta técnica nos permitió saber el momento en el que se formaron los puntos cuánticos de InAs. La densidad y dimensiones de las islas fueron determinadas utilizando microscopía de fuerza atómica (AFM), advirtiéndose significativos cambios en la morfología de los QDs expuestos al Si. Por otro lado, el confinamiento electrónico de los puntos cuánticos fue corroborado por medio de fotoluminiscencia (PL), en donde se observó un corrimiento a mayores energías al disminuir las dimensiones de los QDs. La anisotropía óptica de los puntos cuánticos fue estudiada por medio de espectroscopía de reflectancia diferencial (RDS), observándose variaciones en la forma de línea de los espectros que podrían asociarse a cambios en la morfología superficial.

P5

Propiedades eléctricas de semiconductores orgánicosde Metalo-Ftalocianinas con uso potencial en sensores químicos

Guillermo Jiménez de los Santos
Centro de Investigación en dispositivos semiconductores del ICUAP (CIDS-ICUAP) BUAP.

Las ftalocianinas se han utilizado mucho en la industria y en los centros de investigación. Las principales aplicaciones utilizan ftalocianinas metálicas. A nosotros nos interesa caracterizar eléctricamente a algunas ftalocianinas metálicas con el objetivo de utilizarlas posteriormente en la construcción de algún dispositivo.
Caracterizamos eléctricamente películas de ftalocianinas metálicas (MePc): PbPc, NiPc, CoPc y LaPc. Las películas se obtienen por sublimación térmica sobre substratos de Ito. 1) Obtención de las curvas I vs V de las películas con y sin iluminación; 2) Medición de la capacitancia, utilizando a las diferentes películas como dieléctrico.

P6

Aleaciones metálicas binarias: un estudio de primeros principios

Alejandro Bautista Hernández*, J. F. Rivas Silva
Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48, CP 72570, Puebla, Pue., México

En este trabajo se estudian, por medio de primeros principios, aleaciones binarias tales como CuPd, CuPt, CuAu, CuRh y AlNi. El problema de las teorías clásicas en química y metalurgia es que no pueden explicar cierta "selectividad" estructural observada experimentalmente. Aunado a esto, en el caso de aleaciones binarias, si tenemos N sitios en la red, entonces tendríamos 2^N configuraciones posibles. Esto haría computacionalmente imposible un estudio de primeros principios. Sin embargo, es posible estudiar alrededor de solo 30 estructuras ordenadas y con eso poder cubrir un amplio intervalo de composiciones. Entonces, por medio del cálculo de su entalpía de formación podemos predecir las estructuras mas estables a composición fija y variable y compararlas directamente con las observadas en los diagramas de fases experimentales. A partir de los cálculos que hemos realizado, se observa un buen acuerdo entre teoría y experimento.

P7

Propagación de solitones en fibras ópticas de cristal fotónico

F. Tlapanco y J. Arriaga
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas", Universidad Autónoma de Puebla

Una de las grandes aplicaciones de los cristales fotónicos son las fibras ópticas de cristal fotónico. Estas se construyen mediante un arreglo periódico de agujeros en una matriz de dióxido de silicio. Si uno de los agujeros esta ausente se crea un defecto en la estructura periódica el cual actúa como el núcleo de una fibra óptica. Se ha comprobado tanto teórica como experimentalmente que estas fibras ópticas poseen dispersión anómala a longitudes de onda no alcanzadas por las fibras ópticas convencionales. Resolvemos numéricamente la ecuación de Schrödinger No-lineal usando el método conocido como *Split-step*. Al tomar en cuenta los efectos no lineales en la propagación de luz de muy corta duración, bajo determinadas condiciones la fibra óptica soporta la propagación de solitones, debido a un balance entre los efectos de dispersión de fibra y los No-lineales. Se hace un análisis de los parámetros de la fibra y del pulso de luz que permita la propagación de solitones.

P8

Generación del supercontinuo en fibras ópticas de cristal fotónico

E. Basilio y J. Arriaga
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas", Universidad Autónoma de Puebla.

Las fibras ópticas de cristal fotónico son sistemas que se construyen mediante un arreglo periódico de agujeros en una matriz de dióxido de silicio. Si uno de los agujeros esta ausente genera defectos en la estructura y actúa como el núcleo de una fibra óptica. Estas fibras ópticas poseen propiedades diferentes a las fibras ópticas convencionales. Los efectos no lineales juegan un papel muy importante cuando se lanza un pulso de luz de muy corta duración puesto que se da origen a la generación de un rango de frecuencias muy ancho. En este trabajo estudiamos las generación de frecuencias en fibras ópticas de cristal fotónico. Resolvemos numéricamente la ecuación de Schrödinger No-lineal tomando en cuenta los términos mas importantes que gobiernan la propagación de pulsos ultracortos en un medio no lineal, la generación de frecuencias para diferentes valores de los parámetros de las fibras ópticas de cristal fotónico, comparando los resultados con los obtenidos experimentalmente.

P9

Modelado y caracterización eléctrica y óptica de la estructura Al/SRO/Si

José Alberto Luna López
Centro de Investigación en dispositivos semiconductores del ICUAP (CIDS-ICUAP) BUAP.

En el presente trabajo de tesis de Maestría, el objetivo fue estudiar las características I-V y C-V de la estructura Al/SRO/Si y emplear las aproximaciones de unión PN y capacitor MOS en el análisis físico de la estructura. Así mismo se estudiaron las propiedades eléctricas de las películas de oxido de silicio rico en silicio (SRO), con diferentes Ro depositadas por la técnica de depósito químico en la fase vapor a baja presión (siglas en inglés LPCVD). La temperatura de deposito fue de 700°C.

La técnica LPCVD es un método común empleado para el depósito de SRO. En esta técnica los gases que generalmente se usan son el silano (SiH_4) y el óxido nitroso (N_2O), los cuales reaccionan químicamente en una cámara de cuarzo a la temperatura de 700°C. En este trabajo, el exceso de silicio se controló mediante la razón R_0 de la presión parcial del N_2O y la presión parcial del SiH_4. El índice de refracción y los espesores de las películas se determinaron por elipsometría. Posteriormente se fabricaron las estructuras Al/SRO/Si con diferentes Ro´s depositados sobre sustratos de silicio tipo n. Dependiendo del exceso de silicio y el voltaje aplicado, el dispositivo se comporta como unión inducida P-N o como un capacitor MOS. Se obtuvieron gráficas I-V y C-V. De las graficas I-V se encontró que la corriente de fuga es del orden de picoamperios. Se presentan características no ohmicas de la corriente. Además, conforme los valores de R_0 aumentan, el índice de refracción y la corriente disminuyen; así mismo, el valor de la corriente se incrementa cuando R_0 disminuye. La corriente es altamente dependiente del tipo y concentración del sustrato y de la Ro. De las gráficas C-V se muestra que tenemos intercambio de carga en la región de deserción próxima a la región de inversión y ésta se manifiesta como cambios abruptos en esta región. Cuando el R_0 aumenta, el intercambio de carga disminuye y la carga debida a las trampas aumenta. Se modela los resultados de capacitancia contra voltaje utilizando la teoría del capacitor MOS y la unión P-N. Se estimaron las regiones de deserción (W) y se comparan con las estimadas por la aproximación como unión P-N, y como capacitor MOS incluyendo la deserción profunda en este análisis. Las gráficas I-V con iluminación muestran que la estructura analizada es un buen sensor de luz en el visible . Se reportan los resultados experimentales tales como espesor del oxido y el índice de refracción. También se presentan los parámetros obtenidos como la constante dieléctrica, densidad de trampas en el aislante, tiempo de vida de generación y las aproximaciones a la unión inducida P-N, MOS y deserción profunda, de las gráficas experimentales. Este dispositivo puede ser usado también como una herramienta analítica.

P10

Superconductores tipo II irreversibles bajo campos magneticos cruzados

C.Romero-Salazar
Instituto de Física "Luis River Terrazas" BUAP, Apdo Post.J-48, Puebla, Pue. 72570.

En este trabajo se estudia la respuesta de materiales superconductores isotrópicos sometidos a un campo magnético externo $\mathbf{H_a}$ que varía en magnitud y dirección. Se resuelve numéricamente el sistema de ecuaciones acopladas para el campo eléctrico **E**, la inducción magnética **B** y la densidad de corriente **J** usando el modelo generalizado del estado crítico de Bean. Se presentan resultados para superconductores tanto clásicos como de alta T_c

P11

Detección subterránea de rayos cósmicos de alta energía en el CERN

S. Román[1], A. Fernández[2], E. Gámez[2], E. Linares[3], R. López[2], A. Rosado[1], A. Zepeda[3]
[1]Instituto de Física "Luis Rivera". BUAP.
[2]Facultad de Ciencias Físico Matemáticas, BUAP.
[3]Depto. Física, CINVESTAV-IPN, México.

En el presente trabajo se exponen los resultados de la operación de un detector de muones subterráneo instalado en la caverna de UA2 (BA4), situado a 50 m de profundidad, en CERN, Suiza. Estos muones, son productos de la interacción de rayos cósmicos con la moléculas de la atmósfera. Con este detector se obtiene información para la posible construcción de un detector híbrido para el estudio de rayos cósmicos entre el intervalo de energía de 10^{14} y 10^{16} eV. Este prototipo consta de 4 cámaras de arrastre puestas una encima de la otra de 6m x 4m usadas en el experimento UA1 (Detector de Angulo Sólido en colisionador de $p\bar{p}$ con una energía en el centro de masas de 630 GeV en CERN) junto con dos módulos de otro tipo de cámaras de arrastre, doble plano, usadas en el experimento DELPHI (de las siglas en inglés DEtector with Lepton Photon and Hadron Identification en CERN), colocadas arriba del arreglo anterior. Además, se incluyó a éste diseño, tres contadores de plástico centellador que sirvieron de "disparo" para el diseño experimental. Se describe el trabajo realizado dentro de la construcción, puesta en marcha del detector, así como el análisis de los datos obtenidos en este detector, haciendo énfasis en los siguientes puntos: *i)* encontrar una mezcla de gas no inflamable que no

redujera la eficiencia de las cámaras; *ii)* encontrar una densidad máxima de muones (trazas o trayectorias) que pudieran ser reconstruidas en las cámaras y *iii)* posible uso de un material absorbente que pudiera eliminar chubascos inducidos en las cámaras. Finalmente, se discute el procedimiento de toma de datos y el análisis de reconstrucción de trazas de muones en las cámaras.

P12

Crecimiento y caracterización de aleaciones $Ge_{1-x}Sn_x$ obtenidas por pulverización catódica

H. Pérez Ladrón de Guevara, M. A. Vidal, H. Navarro-Contreras
Instituto de Investigación en Comunicación Óptica (IICO)
Universidad Autónoma de San Luis Potosí (UASLP)

Una de las ideas más fascinantes de la física moderna de semiconductores es la obtención de un material de ancho de banda prohibido directo basado en aleaciones de la columna IV. Es por eso que aleaciones entre Ge y Sn representan un reto de gran interés actualmente. Esta aleaciones metaestables adicionalmente tienen la ventaja de modificar el ancho de banda prohibido con la concentración de Sn. Se ha demostrado que prevalece una transición directa a concentraciones por debajo de 0.15 con variaciones que van de 0.35 a 0.79 eV. Adicionalmente se predice una disminución de la masa efectiva de los electrones conforme aumenta la concentración de Sn con la consecuencia de un aumento importante en la movilidad electrónica.
Sin embargo, el crecimiento de esta aleación tiene grandes problemas, ya que el limite de solubilidad del Sn en Ge es de aproximadamente el 1%, y tiende a segregarse a la superficie. Además se tiene que a bajas temperaturas, el Sn cambia de fase de estructura diamante α-Sn (Sn gris) a estructura tetragonal centrada en el cuerpo β-Sn (Sn blanco) a 13.2^0C. Sin embargo en sistemas de crecimiento fuera de equilibrio como MBE o Pulverización Catódica como en nuestro caso se ha logrado crecer esta aleación a temperaturas de hasta aproximadamente 200^0C, y con concentraciones por debajo del 20% con la importante característica de ser películas monocristalinas.
En un sistema de crecimiento por Pulverización Catódica hemos logrado crecer aleaciones que han alcanzado concentraciones de 0.12. Se ha determinado esta concentración a partir de encontrar los parámetros de red en bulto usando difracción de rayos x de alta resolución. También se han determinado los anchos de banda prohibida de las aleaciones mediante caracterizaciones ópticas de las aleaciones. Espectroscopia Raman se uso también con el fin de correlacionar los anteriores resultados encontrándose que el Sn se segrega a la superficie.

P13

Caracterización estructural de aleaciones $GaAs_xN_{1-x}$ y GaP_xN_{1-x} por difracción de rayos X de alta resolución

Irving Paul Vargas Cruz y Miguel Angel Vidal Borbolla
Instituto de Investigación en Comunicación Óptica (IICO)
Universidad Autónoma de San Luis Potosí (UASLP)

El estudio de los Nitruros de Galio actualmente ha tomado gran interés, por la emisión en el rango azul del espectro que presenta este material, debido a transiciones banda a banda que muestra este semiconductor así como a la alta movilidad que se predice para este mismo. Sin embargo una de las principales problemáticas que se enfrentan para usar este material en dispositivos es que no existe un substrato adecuado para crecer estructuras basadas en GaN. Por esta razón se ha buscado la síntesis de aleaciones basadas en este material que puedan ser crecidos con menos problemas de desajuste de red sobre substratos de constante de red más comúnmente usadas como GaAs, Si y GaP. Durante el desarrollo de esta tesis se analizaron películas de $GaAs_XN_{1-X}$ y GaP_XN_{1-X} depositadas sobre GaAs, GaP y Si con diferentes concentraciones de nitrógeno. Se determinaron los parámetros de red en la dirección de crecimiento y perpendicular a esa dirección a partir de los cuales se logro determinar el parámetro de red en bulto y subsecuentemente la concentración real de nitrógeno en la aleación. Todo esto se realizó por medio de Rayos X de Alta Resolución, con estos resultados se determinó el grado de deformación de las aleaciones encontrándose que se tiene un mayor grado de acoplamiento a un substrato de Si, GaP o GaAs.

P14

Síntesis y caracterización de especies de óxido de fierro embebidas en una matriz de SiO_2

S. Ponce-Castañeda
Centro de Investigación en Materiales Avanzados
CIMAV, Chihuahua, Chih.
Facultad de Ciencias, UASLP

Usando espectroscopías infrarroja y Uv-visible, difracción de rayos-X, DTA y magnetometría de muestra vibrante, se estudia la formación de nanopartículas de óxido de fierro, ferritas de níquel-zinc y hexaferritas de M-bario embebidas en una matriz de SiO_2 preparadas por la técnica sol-gel. Las soluciones iniciales, para la formación de los compuestos, se prepararon mezclando

tetraetilortosilicato (TEOS), agua destilada, etanol y según el caso, ferrita de bario coprecipitada, fierro nanométrico y sales de fierro, zinc y níquel. La relación molar H_2O:TEOS:Et-OH fue de 11.66:1.0:4.0 para todas las soluciones preparadas. Se discute la formación de las diferentes fases de óxidos de fierro y, de oxihidroxidos como especies intermedias, ante tratamiento térmicos y los efectos estructurales causados en la matriz vítrea por la presencia de dichas especies, así como sus propiedades magnéticas.

P15

Caracterización de multipozos cuánticos de InGaAs/GaAs por difracción de rayos X de alta resolución, fotoluminiscencia y fotorreflectancia

Joel Ernesto Montaño Rivas
Instituto de Investigación en Comunicación Óptica
Universidad Autónoma de San Luis Potosí

En el presente trabajo se caracterizan dos heteroestructuras de capas alternadas de $In_xGa_{\{1-x\}}As$/ GaAs por medio de difracción de rayos X de alta resolución (HRXRD), fotoluminiscencia (PL) y fotorreflectancia (PR). Las heteroestructuras forman pozos cuánticos múltiples (MQW) con concentraciones nominales de 10 % y 20 % de Indio en las capas epitaxiales que forman los pozos cuánticos. Dichas heteroestructuras fueron crecidas por medio de epitaxia por haces moleculares (MBE). La técnica de HRXRD proporcionó información estructural de las muestras como los parámetros de red paralelo, perpendicular y en bulto; así como la concentración y la relajación de las películas de la aleación ternaria. Los espectros de PL y PR identifican transiciones ópticas de las heteroestructuras conforme éstos evolucionan en temperatura desde 13 K hasta 300 K.

P16

Topografía y termodinámica de nanocúmulos en la superficie de energía potencial.

Aurelio Tamez
Facultad de Ciencias
Universidad Autónoma del Estado de México

Utilizando la técnica del algoritmo genético en cúmulos de Au 7 modelado con el potencial de Gupta se mapea la superficie de energía potencial (PES) de nanocúmulos usando un gran número de minimizaciones de energía global en los que se encuentran las cuencas de atracción de los puntos silla y mínimos localizados en regiones de baja energía del (PES). Estos puntos silla son localizados mediante el uso de un bin de energía como criterio de convergencia, que para al final de la relajación iterativa local. Los mínimos son derivados a partir de sus respectivos puntos silla tomando en cuenta el criterio de convergencia y la relajación continua. Un gran numero de optimizaciones son mejoradas con aproximaciones estadísticas en patrones del espacio fase entre mínimos y puntos silla. Las propiedades termodinámicas del cúmulo como la capacidad calorífica son determinadas a partir del mínimo global.

P17

Comportamiento del equilibrio liquido-vapor de mezclas fuertemente inmiscibles

José Antonio Moreno Razo. J. Enrique Díaz-Herrera
Departamento de Física
Universidad Autónoma Metropolitana- Iztapalapa

En este trabajo presentamos los resultados de simulación por dinámica molecular de la interfase líquido-vapor para una mezcla binaria tipo Lennard-Jones. Estudiamos el comportamiento del diagrama de fases en el caso de una mezcla fuertemente inmiscible. Los resultados muestran interesantes cambios estructurales entre las fases coexistentes, al incrementar la temperatura. Las fases presentes cambian de la interfase líquido-líquido-vapor a interfases líquidas mojadas por la fase vapor. Investigamos el comportamiento de la tensión interfacial como función de la temperatura, y se estima la temperatura a la cual aparece la transición de mojado

P18

Propiedades electrónicas de superficies semiconducturas ideales

Xochitl López Lozano
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Universidad Autónoma de Puebla

En este trabajo se calcularon la estructura de bandas y la densidad de estados de superficies ideales para Ge, GaAs e InAs. El método que se utilizo fue el de enlace fuerte semi-empírico, haciendo una aproximación a primeros vecinos. Se explican las diversas propiedades electrónicas que revelan estas bandas, entre ellas los estados de superficie. La reproducción de estos resultados es esencial para determinar los estados electrónicos de átomos sobre dichas superficies, especialmente en el caso en que estos forman cadenas atómicas. Nuestro objetivo es conocer las propiedades de estos sistemas unidimensionales, llamados alambres atómicos, con el fin de analizar las posibilidades de utilizarlos en dispositivos de dimensiones atómicas.

P19

Estudio de las propiedades eléctricas de la interfaz silicio-oxido de silicio (nitridado) en películas obtenidas térmicamente con oxido nitroso

Adán. Luna F.[1], Arturo Morales Acevedo[2], Jesús Carrillo L.[1]
1 CIDS-ICUAP
[2] SEES-CINVESTAV

El avance en la tecnología de circuitos integrados ha llegado al punto en que se necesitan capas de dióxido de silicio (SiO_2) por debajo de 2 nm, para obtener un buen desempeño de estos dispositivos. Como sabemos el SiO_2 es la base de su fabricación. Se ha comprobado que a estos espesores el SiO_2 presenta problemas como una barrera ineficiente contra la difusión de boro, flujo de corriente por tuneleo directo, así como degradación debido a electrones calientes, entre otros. Debido a esto, los investigadores se han dado a la tarea de buscar nuevas alternativas para solucionar este problema. Una opción es el óxido de silicio (nitridado). En este trabajo se presenta un estudio sobre las propiedades eléctricas en la interfaz silicio- óxido de silicio (nitridado); para esto, el óxido de silicio (nitridado) se depositó térmicamente empleando óxido nitroso (N_2O), elaborándose dispositivos metal-aislante-semiconductor (MIS, por sus siglas en ingles). Se depositaron nueve muestras, variando la presión y temperatura en un rango de 1 a 3

atm y de 1000 a 1150 °C, respectivamente. Para dicho estudio se realizaron 1) mediciones capacitancia-voltaje (C-V) con el fin de obtener la densidad de estados que existe en esta interfaz (por el método Térman), utilizando un programa en MATHCAD desarrollado en este centro (CIDS-ICUAP); 2) Mediciones de Carga a la ruptura (Q_{tBD}) y 3) Mediciones del Campo Eléctrico que puede resistir el aislante sin romperse. Los resultados hasta ahora obtenidos nos indican que el óxido de silicio (nitridado) causa una densidad de estados muy baja en la mitad del gap del silicio, y además puede soportar un campo eléctrico hasta de 9 MV/cm.

P20

Difusión térmica de partículas brownianas interactuantes

Omar A. Hernández Flores
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Universidad Autónoma de Puebla,
Miguel Mayorga*
Facultad de Ciencias
Universidad Autónoma del Estado de México

Tomando como punto de partida un estudio reciente del movimiento Browniano de partículas coloidales interactuantes bajo un gradiente de temperatura [1], calculamos explícitamente la difusión colectiva y la difusión térmica de partículas coloidales usando diferentes potenciales de interacción modelo. Reportamos los efectos que tienen, tanto las interacciones como la fracción de volumen ocupada por las partículas en la difusión colectiva y térmica. Para probar la validez de nuestra teoría, comparamos con resultados experimentales de una solución de poliestireno en tolueno[2] **.** Mostramos como el enfoque usado puede aplicarse al caso de una suspensión de gotas o burbujas Brownianas inmiscibles. En este caso observamos un movimiento termocapilar de las gotas hacia la dirección de la zona más caliente. Este último efecto es particularmente importante en la manufactura de aleaciones líquidas [3] y ultrapurificación de materiales en condiciones de microgravedad [4].

[1] M. Mayorga, B. Domínguez, L. Romero-Salazar; *Mol. Phys.* (2002) en prensa.
[2] K. J. Zhang, M. E. Briggs, R. W. Gammon, J. V. Sengers; *J. Chem. Phys.* **111** (1999) 2270.
[3] L. Ratke Ed., Immiscible Liquid Metals and Organics, Informationsgesellschaft (1993); L. Ratke, S. Diefenbach, *Mat. Sci. Eng.* **R15** (1995) 263.
4 **R. Balasubramaniam, *Int. J. Multiphase Flow*,** 24 **(1998) 679.**

P21

Dispersión de partículas clásicas en un tipo de guía de ondas con impurezas.

G. Orellana Rivadeneyra*, C. Jung** y G. A. Luna Acosta*.
*Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas", Universidad Autónoma de Puebla.
**Centro de Ciencias Físicas, UNAM, Cuernavaca.

Este estudio físico-matemático consiste en la obtención de las características cualitativas de la dispersión caótica de partículas clásicas en una guía de ondas parabólica con una impureza. Esto se hizo mediante el análisis del tiempo de demora de las partículas dispersadas y el estudio de la topología del espacio fase en la región de dispersión. En particular, se ha puesto interés en la caracterización de lo que se conoce como herraduras de Smale y su relación con los parámetros físicos del sistema.

P22

Frecuencia de relajación superficial de excitones en películas delgadas*

N. Atenco-Analco [a], F. Pérez-Rodríguez [a], N.M. Makarov [b]
[a] Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas", Universidad Autónoma de Puebla.
[b] Instituto de ciencias, Universidad Autónoma de Puebla.

Aplicando el método auto consistente de la función de Green, se investiga el efecto de la rugosidad superficial sobre la frecuencia de relajación superficial ν de excitones en películas delgadas. La investigación se lleva a cabo cerca de la frecuencia de la resonancia excitónica donde la dispersión espacial es importante. Mostramos que la relajación del excitón se debe a la dispersión de su movimiento translacional por las superficies rugosas de la película. Se obtiene la dependencia explícita de ν en términos de los parámetros estadísticos que caracterizan el desorden superficial, el ancho medio de la película *d* y las propiedades del excitón. El espectro de la frecuencia de relajación en función de la frecuencia de la luz incidente muestra una serie de resonancias, las cuales se deben a la cuantización del movimiento de centro de masa.

P23

Acoplamiento foton-fonon en superficies de semiconductores

F. L. Pérez Sánchez
Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas", Universidad Autónoma de Puebla.

Investigamos teóricamente el acoplamiento fotón-fonón en superficies de semiconductores homopolares con estructura de diamante y su manifestación en los espectros de anisotropía de reflectancia para diferentes tipos y condiciones de las superficies de los cristales.
Aplicando el modelo adiabático de cargas de enlace (*BCM*), se ha obtenido de manera analítica dentro de la aproximación armónica, la solución del sistema de ecuaciones para el campo electromagnético y los desplazamientos atómicos en el volumen, de un cristal con estructura de diamante (modos de bulto). Conociendo los modos electromagnéticos y vibracionales de bulto, la solución del sistema de ecuaciones acopladas para el campo electromagnético y las vibraciones de una red cristalina semi-infinita se puede simplificar notablemente. En este trabajo se estudia el acoplamiento fotón-fonón en superficies (001) relajadas y reconstruidas, bajo el proceso de dimerización, de Silicio y Germanio.

P24

Estudio preliminar de la estructura electrónica del compuesto $CeFeGe_3$.

E. Chigo-Anota
Facultad de Ciencias Químicas-Instituto de Ciencias
Universidad Autónoma de Puebla
A. Flores-Riveros, J. F. Rivas-Silva* y A. Bautista-Hernández
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Universidad Autónoma de Puebla

Mediante las aproximaciones, **FP-LAPW** (implementada en el programa **WIEN97**) y **LMTO-ASA** (implementada en el programa **LMTO-ASA**) dentro de la teoría **DFT** se investiga la estructura electrónica del compuesto Kondo **CeFeGe3**.
Los cálculos ab-initio (o de primeros principios) aquí realizados son la *optimización de la geometría, densidad de estados* (DOS), y *estructura de bandas* (EB) en las metodologías antes mencionadas y comparamos los resultados obtenidos por dichas aproximaciones.

Esta etapa preliminar de estudio se realiza para una mejor compresión del material como compuesto Kondo.

Se agradece al Centro de Computo del Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas" de laBUAP las facilidades otorgadas para la realización de dicho trabajo.
Trabajo apoyado por **CONACYT**, proyecto No. **32213-E**. y La Vicerrectoría de Investigación y Estudios de Postgrado, (**VIEP**, proyecto No. **II-60G01**).

P25

Nanopartículas bimetálicas coloidales de Cu/Pd y Ni/Pd recubiertas con polímero PVP: estudio estructural a través de campos de fuerza.

M. López-Fuentes, J.F. Rivas-Silva
Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas”,
Universidad Autónoma de Puebla

En los últimos años se ha puesto atención a sistemas metálicos nanométricos [1,2,3,4] debido a las propiedades catalíticas que estos presentan y la eficiencia de la catálisis relacionada con el control logrado de su tamaño y de su composición. La interacción de nanopartículas metálicas con material orgánico (principalmente con polímeros) que controla la estabilidad de esas partículas y los fenómenos cooperativos de estos materiales compuestos necesitan explicarse teóricamente. El desarrollo de modelos físicos que expliquen la formación y propiedades de este tipo de sistemas es muy reducido en la actualidad. El entender la geometría que adoptan los complejos así como su estructura electrónica, es esencial para predecir las diferentes formas de enlace e interacción con el medio en el cual se encuentren. Debido a esto se plantea estudiar a estos sistemas mediante campos de fuerza, en especial los llamados de segunda generación, en este trabajo damos resultados obtenidos a través de estos campos y se hace una comparación con el experimento y trabajos previos utilizando otros métodos [5].

[1] Lu, P.; Teranishi, T.; Asakura, K.; Miyake, M.; and Toshima, N.; J. Phys. Chem. **103**, 9673 (1999).
[2] Toshima, Naoki. Fine Particles Science and Technology, edited by Kluwer Academic Publisher (Netherlands) 1996, pp 371-383.
[3] Wang, Y.; Liu, H.; and Toshima, N.; J. Phys. Chem. **100**, 19533 (1996).
[4] Toshima, N.;, and Wang, Y.; Langmuir, **10**, 4574 (1994).
[5] Lu Z.W.;Wei H., and Alex Zunger; Frota-Pessoa S.; Ferreira, L. **44**, 512 (1991).

P26

Producción de entropía en suspensión de partículas esferocilíndricas

J. Mulia y J.Orozco.
Facultad de Ciencias Universidad Autónoma del Estado de México.

En una suspensión de partículas esferocilíndricas (un esferocilindro es un cilindro de longitud L en el cual en cada extremo cuenta con un hemisferio de diámetro D), un parámetro tensorial de orden Q aparece como una nueva variable termodinámica. Siguiendo la relación de Gibbs y utilizando las ecuaciones de balance como se ve en la literatura de Groot y Mazur y el trabajo de Rubi se determina la producción de entropía como función de la posición r y el tiempo t, en donde se puede observar que cualquier cambio en Q permite cambios en la entropía del sistema.

P27

Respuesta óptica de magnetoexcitones en un doble pozo cuántico*

B. Flores Desirena,
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas". Universidad Autónoma de Puebla

Se estudian teóricamente espectros de reflexión y absorción de magnetoexcitones en un doble pozo cuántico (DPC) semiconductor. Para la determinación de los espectros ópticos se utiliza el formalismo de Stahl, el cual acopla la amplitud de onda coherente electrón-hueco y los campos electromagnéticos. Nos enfocamos a un DPC de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ ($x = 0.3$) y mostramos la dependencia de la reflexión y absorción como función del ancho de la barrera inter-pozo o del ancho de los pozos, reproduciendo con esto los resultados obtenidos mediante otro formalismo [1]. En el futuro incluiremos un campo eléctrico estático perpendicular o paralelo al DPC.

1 Francisco Vera and Zdenka Barticevic, J. Appl. Phys. **83**, 7720 (1998)

* Trabajo parcialmente apoyado por CONACyT (Proyecto 36047-E)

P28

Crecimiento por DBQ y caracterización de películas de CdSe con Cd/Se <1 *

M. E. Hernández-Torres
R. Silva-González y J. M. Gracia-Jiménez,
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Universidad Autónoma de Puebla

El selenuro de cadmio (CdSe), debido a su ancho de banda prohibida, es un semiconductor importante como material base en la fabricación de celdas solares. Se fabricaron películas delgadas de CdSe por el método de deposición en baño químico (DBQ). Las películas obtenidas son policristalinas, y se observa que el control en las condiciones experimentales permite el mejoramiento de la calidad morfológica, es decir, disminuye la cantidad y tamaño de defectos sobre la superficie. Además se observa reproducibilidad en la razón atómica (Cd/Se), la cual presenta exceso de selenio.

* Apoyado por CONACyT (Proyectos:1600PE, 5269N, VIEP II-59G01)

P29

Propiedades electrónicas de pozos cuánticos del tipo ZnS/ZnSe.

L. R. Sagredo Hernández, J. Madrigal Melchor, D. A. Contreras Solorio.
Universidad Autónoma de Zacatecas. Escuela de Física.

Se estudian las propiedades electrónicas de pozos cuánticos tensionados basados en el sistema ZnS/ZnSe. Este estudio se realiza con la aproximación de enlace fuerte, con base sp3s*, interacciones entre primeros vecinos e inclusión de la interacción espín-órbita. El cálculo se hace usando los parámetros de enlace fuerte, los cuales se obtienen de información experimental de las bandas de los semiconductores en cuestión

P30

Estudio de la Adsorción de HCl sobre la superficie del Germanio (001)

A. Sánchez Castillo, G. Hernández Cocoletzi
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Universidad Autónoma de Puebla
N. Takeuchi.
CCMC-UNAM

Se estudia la adsorción del HCl y del Cl en la superficie Ge(001)-c(2x4) mediante cálculos de primeros principios de la energía total usando el formalismo de Car y Parinello (CP), y la aproximación de densidad local (LDA). El esquema de CP se basa en la teoría del funcional de la densidad y las interacciones entre los electrones e iones se tratan con pseudopotenciales que conservan la norma. La superficie se estudia aplicando la aproximación de la supercelda y la optimización de la estructura atómica se realiza mediante el método del descenso más rápido. Empleamos una supercelda con 5 capas atómicas, cada capa se forma de 16 átomos. Iniciamos el trabajo investigando la adsorción del HCl en dos posibles formas; primero la molécula de HCl disociada con tres configuraciones diferentes y en segundo lugar, la adsorción de la molécula de HCl sin disociar. Finalmente estudiamos la adsorción del Cl sobre la superficie Ge(001) para tres configuraciones geométricas. De las estructuras estudiadas hemos encontrado que la más estable corresponde a la adsorción de dos átomos de Cl sobre un dímero de Ge.

P31

Concentración de radón-222 en Zacatecas: monitoreo con detectores de estado sólido

M.L. García[1], L.L. Quirino[1], A. Chavez[2], F. Mireles[1]
[1]CREN, UAZ, Cipres 10, 98000 Zacatecas, Zac. México
[2]ININ, Ap. Post. 18-1027 Mexico, D.F.; Mexico

Como parte de la evaluación del riesgo a la salud debido a la inhalación de radón y sus productos de decaimiento, las concentraciones de radón en interiores y exteriores son medidas en casas habitadas en el estado de Zacatecas. Estas mediciones se realizan en las cabeceras municipales en colaboración con el IMSS y la SSZ, utilizando el método pasivo de trazas nucleares en sólidos. El detector utilizado es la película LR 115 tipo 2, colocado en un contenedor abierto. Empleando un procedimiento de ataque químico y un sistema de conteo semiautomático por chispeo eléctrico.

En este trabajo se describe el diseño del monitoreo que se ha realizado desde Julio de 2001, así como la operación y calibración del equipo necesarios para estimar la dosimetría debida al radón. Se consideran algunos parámetros geológicos de Zacatecas, para la ubicación de las regiones con diferentes características donde se realizan las mediciones.

P32

Difusividad térmica de materiales orgánicos e inorgánicos varios

V. Dossetti-Romero y E. López-Cruz.
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Universidad Autónoma de Puebla

Con el empleo de la técnica de espectroscopía fotoacústica de celda abierta, se obtuvo el valor de la difusividad térmica para una colección de muestras elaboradas a partir de diversos materiales tanto orgánicos como inorgánicos. Dentro de los materiales orgánicos se caracterizó la cera de candelilla, mientras que los inorgánicos comprenden principalmente una colección de muestras de ceniza volcánica proveniente del volcán Popocatépetl, una muestra metálica de aluminio de ~3 mm de espesor y algunas muestras de materiales electro-rheológicos. Estos materiales fueron elaborados en forma laminar con un área de aproximadamente 1 cm^2. En el caso particular de las muestras de ceniza volcánica, las cuales fueron recolectadas entre el período de diciembre de 1994 y enero de 2001, se prepararon en forma de un material compuesto o *compósito* sobre una matriz de pegamento blanco. De esta manera, lo que se obtiene de la medición es el valor de la difusividad térmica del material compuesto y no de la ceniza en si. Sin embargo, debido a que la elaboración y caracterización de estas muestras se realizó de forma sistemática, es posible comparar los valores obtenidos para las muestras de diferentes fechas. En cuanto a las muestras de materiales electro-rheológicos, se obtuvo el valor de la difusividad térmica en presencia de un campo eléctrico y con intensidades diferentes. Para la mayor parte de nuestras muestras se observó que el efecto predominante en la generación de la señal fotoacústica es el flexionamiento termoelástico o "efecto tambor", mientras que en el caso de la muestra de aluminio el fenómeno que predomina es el de difusión térmica. También se logró reproducir algunos resultados que se pueden encontrar en la literatura.

P33

Contraparte clásica de la matriz de probabilidades de dispersión y 'funciones de onda' clásicas para billares bidimensionales caóticos abiertos

J. A. Méndez-Bermúdez y G. A. Luna-Acosta
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Universidad Autónoma de Puebla

Se realiza un estudio clásico y cuántico de las propiedades de dispersión en el régimen balístico de partículas en billares bidimensionales caóticos abiertos. Se construye la contraparte clásica de la matriz de probabilidades de dispersión (MPD) $|S_{m,n}|^2$ para una guía de ondas con caos Hamiltoniano genérico. Se muestra que el conocimiento de la estructura de la MPD clásica nos ayuda a entender el origen dinámico de propiedades cuánticas de dispersión, aún para un numero pequeño de modos de propagación. Además se explica la construcción de 'funciones de onda' clásicas utilizando un método de conteo de trayectorias. La buena correspondencia clásico-cuántica entre funciones de onda permite predecir la forma (en espacio configuracional) de las funciones de onda cuánticas con un costo computacional mínimo. Se discuten los alcances de la construcción de MPD y funciones de onda clásicas en función de la topología de la guía de onda en consideración.

P34

Determinación de concentraciones en una mezcla por difracción de rayos X

J. Alberto Armendáriz C., Francisco Cruz G. J. Gerardo Cabañas M.
Departamento de Ciencia de Materiales. Escuela Superior de Física y Matemáticas
Instituto Politécnico Nacional

La química analítica cuantitativa fácilmente proporciona la composición elemental de un material, pero tiene grandes dificultades en distinguir la identidad química de las diferentes fases en una mezcla, y en determinar la cantidad precisa de cada fase presente.
El análisis por difracción de rayos X, sin embargo, es la técnica perfecta para el análisis de mezclas cristalinas, debido a que cada componente de la mezcla produce un patrón característico independiente, haciendo posible la diferenciación de una fase con respecto a otra. Los métodos de análisis cuantitativo se clasifican en dos grandes grupos, que son:

a) Los que utilizan la Intensidad Integrada de los picos máximos

- ***Análisis Directo***: Donde la concentración se determina a través de una curva de calibración construida mediante la comparación de mediciones de intensidades experimentales con intensidades de fases puras
- ***Estándar Interno***. Donde la concentración se determina en base a la medición de la intensidad de un pico máximo de la fase de interés y de un pico máximo de una fase estándar que se agrega en una concentración determinada.
- ***Comparación directa***: Donde con valores experimentales del coeficiente de absorción de una muestra, y valores de densidad e intensidad del mismo componente puro, se calcula un coeficiente "K", relacionado directamente con la concentración

b) *Los que hacen un ajuste de perfil de pico*

- ***Refinamiento de Rietveld:***

El *Refinamiento de Rietveld* se basa en ajustar un difractograma teórico a uno experimental, mediante el método de mínimos cuadrados hasta obtener el mejor ajuste. Sin embargo los aspectos estructurales que se enfrentan con el método son diversos y se reflejan en los diferentes parámetros que se ajustan en el modelo de la sustancia. Estos parámetros denominados refinables se clasifican en dos tipos:

- ***Globales***.
  - Relacionados con la óptica del equipo
  - Cero del equipo
  - Perfil Instrumental
  - Asimetría de los perfiles
  - Fondo
  - Longitud de onda
  - Desplazamiento de la muestra
  - Transparencia de la muestra
  - Absorción

- ***Estructurales***.
  - Característicos de cada fase
  - Posiciones de los átomos en la celda unidad
  - Factor de ocupación
  - Factores térmicos isótropos y anisótropos
  - Factor de escala
  - Parámetros que determinan el perfil de los máximos
  - Orientación preferencial
  - Tamaño de Crsitalita y microtensiones
  - Extinción

Como ejemplificación del método se mostrara el ajuste realizado sobre el difractograma de una aleación Fe-TiN producida por el proceso de aleado mecánico.preparada al 25% en peso de TiN. En esta muestra bifásica se aplicaron los programas powercell y Fullproff obteniéndose los siguientes resultados:

PROGRAMA	*Fe%*	*TiN%*
POWERCELL	76	24
FULLPROFF	71	29

Esto demuestra la efectividad de ambas implementaciones como herramientas de análisis cuantitativo.

P35

Entropía y escalas de tiempo de disipación de líquidos

Daniel Osorio González, Miguel Mayorga, Lorena Romero
Facultad de Ciencias
Universidad Autónoma del Estado de México

Mediante simulaciones de Dinámica Molecular se reproducen funciones de correlación de pares experimentales , éstas permiten ajustar un potencial de interacción molecular a distintos líquidos y con ello calcular la entropía estadística de los mismos. Se hace una comparación con la entropía termodinámica medida experimentalmente. Discutimos la ley de incremento de entropía en términos de la autocorrelación de fuerzas del sistema y su relación con la información de Fisher, lo cual nos permite establecer las escalas de tiempo para el decaimiento al equilibrio local en líquidos.

P36

Cálculo de la Estructura Electrónica de la Superficie (001) de MgO

Roxana Licona
Facultad de Ciencias Químicas
Universidad Autónoma de Puebla
Dr. J. F. Rivas-Silva
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Universidad Autónoma de Puebla

En este trabajo se presentan cálculos *ab initio* basados en la Teoría de Funcionales de la Densidad (TFD) y en el método de pseudopotenciales, del cristal de MgO y su superficie (001). Muchos de los cálculos *ab initio* en materia condensada están basados en esa teoría en la que es necesario emplear una aproximación conveniente para la energía de intercambio y correlación. Aquí se han empleado la aproximación local (LDA) y una extensión de ésta que involucra términos no locales (llamada corrección por gradientes o GGA). Se comparan los resultados obtenidos en el cálculo de las estructuras de equilibrio y de la energía del material, el cual por sus propiedades químicas se emplea como catalizador o como soporte catalítico.

P37

Estudios de primeros principios de la reconstrucción de la superficie Si(001)-(3x4) inducida por la adsorción de Ga

J. Cotzomi Paleta, G. Hernández Cocoletzi,
IFUAP
N. Takeuchi
CCMC-UNAM

Estudiamos mediante cálculos de primeros principios de la energía total, la reconstrucción inducida por Ga en la superficie Si(001)-(3x4). Usamos el formalismo de Car y Parinello (CP) y la aproximación de densidad local (LDA). El esquema de CP se basa en la teoría del funcional de la densidad y las interacciones entre los electrones e iones se tratan con pseudopotenciales que conservan la norma. La superficie se estudia aplicando la aproximación de la supercelda y la optimización de la estructura atómica se realiza mediante el método del descenso más rápido. Empleamos una supercelda con cinco capas atómicas, cada capa se forma de doce átomos de Si. Los estudios se realizan considerando los modelos de Zhu *et al*, Zotov *et al* y Bunk *et al*. Para construir estos modelos consideramos la superficie Si(001)-(3x4) sin reconstruir y colocamos

sobre ésta una capa atómica combinada de Si y Ga. La estructura de Zhu *et al* se obtiene poniendo diez átomos de Si formando dimeros y dos átomos de Ga y un Si extra en la parte superior para formar la subunidad de Si-Ga. El modelo de Zotov *et al* consta de una capa de seis Si y seis Ga colocados formando dimeros. Por último, la estructura de Bunk *et al* se forma colocando sobre la superficie Si(001)-(3x4), una capa con seis átomos de Si y seis de Ga y un átomo adicional de Si para obtener la subunidad Si-Ga. De las estructuras estudiadas hemos encontrado que la más estable corresponde al modelo de Bunk *et al*. Este modelo explica de manera satisfactoria las imágenes de STM para las reconstrucciones inducidas por In y Al cuando estos se depositan a altas temperaturas.

P38

Estructura de bandas fotónicas para una fibra óptica de cristal fotónico

Briseida Meneses Alviso
Instituto de Física "Luis Rivera Terrazas"
Universidad Autónoma de Puebla

Las fibras ópticas de cristal fotónico se construyen rodeando el núcleo de la fibra con un cristal fotonico bidimensional. Si el índice de refracción del núcleo es mayor que el índice de refracción del cristal fotónico, la propagación de las ondas electromagnéticas ocurre debido al fenómeno de reflexión total interna. Sin embargo, esto no ocurre si el índice de refracción del núcleo es menor que el índice de refracción del cristal fotónico. Se ha demostrado experimentalmente que es posible la propagación de ondas electromagnéticas en estas condiciones, siempre y cuando el cristal fotónico rodeando al núcleo posea un gap fotonico completo. En este caso la propagación de las ondas electromagnéticas a lo largo del núcleo se debe a la expulsión de los modos debido al gap fotónico de la estructura. Esto permite la fabricación de fibras ópticas cuyo núcleo este compuesto por aire, obteniéndose la máxima velocidad del propagación y la mínima perdida de energía.
En este trabajo calculamos la estructura de bandas de un cristal fotónico formado por un arreglo hexagonal de aros de dióxido de silicio en una matriz de aire. Se analizan las condiciones para las cuales existen gaps fotónicos completos en el sistema para la propagación de las ondas electromagnéticas, tanto en el plano de periodicidad como fuera de el. La estructura de bandas se obtiene resolviendo las ecuaciones de Maxwell usando el método de ondas planas.

P39

Cálculo de la concentración de impurezas incorporadas en una película delgada

A. Canizo-Cabrera, Neftalí Pérez-Amaro, Bernardo Cumplido-Espíndola,
J.C. Pérez-Hernández, Omar Pérez-Amaro y Valentín García-Vázquez
Instituto de Física LRT, Universidad Autónoma de Puebla

Presentamos un método novedoso para determinar, de manera teórica, la concentración de impurezas incorporadas en una película delgada. El método de cálculo está basado en el uso de curvas de calibración obtenidas empíricamente al correlacionar mediciones eléctricas de bajo nivel con los parámetros de crecimiento. La fabricación de recubrimientos metálicos de alta calidad (con niveles muy bajos de concentración de impurezas) se realizó mediante sputtering magnetrón en un sistema de alto vacío operado limpiamente por bombeo criogénico (presión base de $5H10^{-8}$ Torrs) en el cual se implemento un controlador de conductancia altamente confiable. Las mediciones eléctricas con niveles extremadamente bajos de ruido se realizaron con instrumental de alta precisión (picoamperes y nanovolts) dentro de un diseño experimental optimizado para caracterizar materiales superconductores. Se presentan detalles del método de cálculo, la forma de como puede ser utilizado para identificar los parámetros críticos de fabricación, y la manera de minimizar las impurezas presentes en materiales metálicos depositados en forma de películas delgadas mediante la técnica de sputtering.

Trabajo financiado por CONACyT, proyectos F541-E9309, 3427P-E9607 y 481110-000/456-0/PAD; por la SEP, asignaciones FOMES 96-97, 98-99, 2000-2001 y PROMEP 2000; y por la Universidad Autónoma de Puebla, proyecto VIEP II-17I01.

P40

Software de control para realizar mediciones automáticas de van der Pauw

Neftalí Pérez-Amaro, J. C. Pérez-Hernández, Bernardo Cumplido-Espíndola
y Valentín García-Vázquez
Instituto de Física LRT, Universidad Autónoma de Puebla

El método de van der Pauw es una técnica estándar de medición para determinar la resistividad eléctrica superficial en materiales. Su uso principal se encuentra en la industria semiconductora, en donde el método es utilizado en laboratorios de alta tecnología como una herramienta para

determinar la uniformidad de los recubrimientos que se hacen sobre obleas extensas de silicio, o como una técnica local de medición de la película delgada conductora que se requiere durante la manufactura de pantallas planas, etc. Básicamente, el método consiste en aplicar una corriente entre dos terminales y medir la caída de voltaje entre las dos terminales opuestas. Dentro de una geometría de cuatro puntas, se requieren hasta un total de ocho configuraciones por medición. Hemos implementado un sistema automático de medición de van der Pauw utilizando instrumental de medición de alta precisión con interfases IEEE-488. Se presenta el software de control que hemos diseñado y desarrollado para seleccionar digitalmente la configuración deseada y medir la resistividad de superficie. Se exponen detalles sobre las configuraciones básicas de prueba, los procedimientos de medición y los cálculos necesarios para realizar mediciones confiables de resistividad en recubrimientos metálicos usando el método de van der Pauw.

Trabajo financiado por CONACyT, proyectos F541-E9309, 3427P-E9607 y 481110-000/456-0/PAD; por la SEP, asignaciones FOMES 96-97, 98-99, 2000-2001 y PROMEP 2000; y por la Universidad Autónoma de Puebla, proyecto VIEP II-17I01.

P41

Transiciones de fase en mezclas neutras de líquidos de Yukawa

María de los Angeles Pérez Azcona
Instituto de Física, Universidad Autónoma de Puebla

Estudiamos las transiciones de fase líquido – vapor de mezclas de líquidos de Yukawa neutras. Las partículas que conforman el sistema son esferas duras de igual diámetro; para distancias mayores que el diámetro, las partículas interactúan a través del potencial de Yukawa, el cual tiene amplitudes de interacción factorizables.
Los parámetros del estado crítico y la curva de coexistencia del sistema, se obtuvieron partiendo de la solución para la cerradura de Yukawa de Lesser Blum y Mitsuaki Ginoza. En particular, se usan las expresiones para la ecuación de estado vía la energía y para el potencial químico; éstas son muy sencillas y de fácil implementación; la curva de coexistencia se obtiene igualando los potenciales químicos de la fase gaseosa y líquida. Los resultados se aplican a mezclas binarias; se encuentra que solamente los sistemas cuyas partículas de la misma especie se repelen y de especie opuesta se atraen, presentan una transición de fase líquido – vapor.