División de Materia Condensada

DMC

Sociedad Mexicana de Física

Cuarta Reunión Anual

22 - 25 de abril de 2014

UNAM Campus Morelia

Libro de Resúmenes

División de Materia Condensada

DMC

Sociedad Mexicana de Física

4ª REUNIÓN ANUAL DE LA DIVISIÓN DE MATERIA CONDENSADA

CAMPUS MORELIA DE LA

UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

MORELIA, MICHOACÁN

22 – 25 DE ABRIL DE 2015

CONTENIDO

Mensaje de bienvenida ◆ 5

Programa ◆ 7

Conferencias invitadas ◆ 11

Contribuciones orales ◆ 25

Sesión mural ◆ 41

Cuidado de la edición

Oracio Navarro Chávez

Alan Dierick Ortega Gutiérrez

Yesenia Arredondo León

El contenido de los trabajos aceptados para este evento es responsabilidad de los autores

Mensaje de bienvenida

El concepto de materia condensada comprende diversas manifestaciones de la materia: el estado sólido, fluidos, materiales biológicos, nanoestructuras, cristales líquidos, polímeros, entre otros. A estas manifestaciones se encuentran asociados una gran riqueza de fenómenos tan cotidianos como la transparencia u opacidad de los materiales, el magnetismo, las propiedades mecánicas, o fenómenos tan sofisticados como la superconductividad, el efecto Hall cuántico y los líquidos de espines, que son sólo unos pocos ejemplos. En los procesos en materia condensada se encuentran involucradas, además, diversas escalas temporales: desde femtosegundos para procesos electrónicos en estado sólido, hasta millones de años en el transcurso de las eras geológicas.

Para comprender las propiedades de la materia condensada se formulan una gran cantidad de preguntas fundamentales sobre la complejidad de los sistemas de muchas partículas, se llevan a cabo experimentos y se desarrollan prototipos para construir las bases de las aplicaciones en áreas como la ciencia de materiales, la nanotecnología, la química, la ecología, medicina y biología. Lo anterior motiva a la comunidad científica a mantenerse en una constante comunicación sobre los avances y dificultades reconocidas en el trabajo cotidiano de investigación. Uno de estos esfuerzos se realiza con la Reunión Anual de la División de Materia Condensada de la Sociedad Mexicana de Física, durante la cual compartiremos la discusión de diversos desarrollos en el área. Este evento busca también tener un impacto en la formación de nuevas generaciones de científicos, con una visión interdisciplinaria de la ciencia y una gran capacidad de reflexión sobre su entorno y las posibilidades que ofrecen la comprensión y manipulación de los sistemas.

Les doy la más cordial bienvenida a la Ciudad de Morelia esperando que no solamente disfruten esta reunión, sino también de su riqueza artística y tradicional.

Yesenia Arredondo León

Presidente de la DMC-SMF

Comité organizador local

Oracio Navarro Chávez

Alan Dierick Ortega Gutiérrez

Yesenia Arredondo León

Consejo consultivo

Julio Mendoza Álvarez, CINVESTAV-D.F.

Héctor Riveros Rotgé, IF-UNAM

Miguel Cruz Irisson, ESIME-IPN

Jesús Arriaga Rodríguez, IF-BUAP

Miguel Ángel Ávalos Borja, IPICYT-S.L.P.

Miércoles 22 de abril

19:00 – 20:00	**Recepción en el Centro Cultural Morelia de la UNAM**

Jueves 23 de abril

9:00-9:30	**INAUGURACIÓN**
9:30-10:15	**Florentino López Urías**
10:15-11:00	**Gonzalo Viramontes Gamboa**
11:00-11:15	DMC - 01
11:15-11:30	DMC - 02
11:30-12:00	**RECESO**
12:00-12:45	**Ricardo Morales Estrella**
12:45-13:30	**Alberto Beltrán Morales**
13:30-13:45	DMC - 03
13:45-14:00	DMC - 04
14:00-16:00	**COMIDA**
16:00-16:45	**Agustín Conde Gallardo**
16:45-17:00	DMC - 05

Viernes 24 de abril

9:00-09:45	**Luis Mochán Backal**
9:45-10:30	**Juan Faustino Aguilera Granja**
10:30-10:45	DMC - 06
10:45-11:00	DMC - 07
11:00-11:15	DMC - 08
11:15-11:30	DMC - 09
11:30-12:00	**RECESO**
12:00-12:45	**Noboru Takeuchi**
12:45-13:30	**Alberto Rubio Ponce**
13:30-13:45	DMC - 10
13:45-14:00	DMC - 11
14:00-16:00	**COMIDA**
16:00-16:45	**Guillermo Ramírez Galicia**
16:45-17:00	DMC - 12
17:00-17:30	**RECESO**
17:00-19:00	**Sesión de carteles**

Sábado 25 de abril

9:00-9:45	**Rosario Paredes**
9:45-10:30	**Isaac Rodríguez Vargas**
10:30 – 10:45	DMC - 13
10:45-11:15	**RECESO**
11:15-12:00	REUNIÓN DMC
12:00-12:30	**CLAUSURA**

Programa

Conferencias invitadas

Electronic properties of $Ni_{26-p}X_p$ (X = Pd, Pt) nano-clusters. A density-functional-theoretic study

F. Aguilera-Granja

Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, 78000 San Luis Potosí, México

We performed density-functional-theoretic calculations to investigate the structural, energetic and electronic properties of the binary clusters $Ni_{26-p}X_p$ (X = Pd, Pt). For small p, Pd and Pt clusters exhibit similar polyicosahedral structures and similar chemical order, the Pd or Pt atoms occupying positions with the lowest possible coordination numbers, forming "islands" separated from each other on the cluster surface. For intermediate and large p there are marked differences between the Pd and Pt clusters. Notably, all the $Ni_{26-p}Pd_p$ clusters are polyicosahedral, whereas $Ni_{26-p}Pt_p$ clusters transition from polyicosahedral to cubic between p = 18 and p = 22. Also, whereas Pd atoms continue to constitute separated surface islands for as long as possible as p increases, until the islands eventually coalesce to form a shell surrounding an Ni core, $Ni_{26-p}Pt_p$ clusters transition from the "separated surface islands" configuration to the all-Pt structure via a series of configurations featuring Pt and Ni layers.
We also comment the results for other nano-clusters of different transition metals with different configuration shapes.

PACS numbers: 75.75+a; 36.40Cg; 75.30.Pd; 75.50.-y
Keywords: DFT calculations, structural properties, electronic properties, transition metal clusters

Fenómenos de transporte en baterías de metal líquido

Alberto Beltrán Morales

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

La generación de energía eléctrica a través de fuentes de energía renovables ha contribuido a solventar la demanda energética mundial. Dichas tecnologías, debido a la intermitencia en la generación, requieren el diseño, la construcción y el uso de dispositivos almacenadores de energía acoplados a la red eléctrica; dada la problemática anterior es necesario el desarrollo y búsqueda de nuevas tecnologías entre ellas las celdas galvánicas líquidas de tres capas, mejor conocidas como baterías de metal líquido (BML), que están compuestas de líquidos conductores a temperatura elevada a través de los cuáles se hace circular una corriente eléctrica durante el proceso de carga/descarga [1, 2]. La posibilidad de escalamiento industrial de la tecnología de BML depende de lograr un entendimiento claro de todos los fenómenos involucrados en el funcionamiento y operación de éstas. Durante el proceso de carga la corriente eléctrica interactúa con su propio campo magnético generando una fuerza de Lorentz que induce movimiento en las capas estratificadas. En el presente trabajo se estudia de forma numérica la convección natural en un electrodo de metal liquido, como el que se propone para usarse en las BML. Dependiendo del gradiente de temperatura se observan diferentes regímenes de flujo, los cuales se ven afectados al inyectar corriente eléctrica en el sistema. El modelado matemático del problema involucra la solución de las ecuaciones de masa, cantidad de movimiento y energía para un fluido incompresible, viscoso y conductor de la electricidad. La solución numérica es implementada usando el software libre OpenFOAM [3] y los resultados son comparados con los reportados experimentalmente por Kelley and Sadoway [4].

References

[1] D. J. Bradwell, H. Kim, A. H. C. Sirk, and D. R. Sadoway, J. Am. Chem. Soc. 134, 1895-1897 (2012).
[2] H. Kim, D. A. Boysen, J. M. Newhouse, B. L. Spatocco, B. Chung, P. J. Burke, D. J. Bradwell, K. Jiang, A. A. Tomaszowska, K. Wang, W. Wei, L. A. Ortiz, S. A. Barriga, S. M. Poizeau, and D. R. Sadoway, Chem. Rev. 113, 2075–2099 (2013).
[3] OpenFOAM Foundation 2012 http://www.openfoam.org/
[4] D. H. Kelley and D. R. Sadoway, Physics of Fluids 26, 057102 (2014).

Superconductividad en la familia 1111 de los oxipnictogenos

Agustín Conde Gallardo

Departamento de Física del Centro de Investigación y Estudios Avanzados
Instituto Politécnico Nacional, México D.F.

El desarrollo de materiales superconductores con temperaturas de transición (Tc) altas, es uno de los problemas abiertos dentro de la Física del Estado Sólido. A pesar de que dicha búsqueda a veces ha tenido algún sustento teórico, como bien puede ser el modelo de formación de pares de Cooper a través de lo que se conoce como acoplamiento electrón-fonón, los descubrimientos más trascendentes se han dado de manera empírica y casi fortuita, y a veces surgiendo en materiales completamente inesperados que parecen estar en contraposición a los conceptos más aceptados en superconductividad, pero a la vez incentivando nuevas propuestas en Estado Sólido. Uno de los ejemplos más importantes de este tipo de superconductores es el del grupo conocido como oxipnictogenos o superconductores basados en Hierro, cuyo descubrimiento ocurrió en 2008, y que junto con los famosos superconductores de alta temperatura crítica (HTc) o cupratos, forman hoy los ejemplos más claros de lo que se conoce como superconductividad no convencional. En esta plática, se presentan las características generales de los superconductores oxipnictogenos, enfatizando los conceptos y/o propiedades físicas que los diferencian de otras familias. Así mismo, se describen las dificultades experimentales que surgen tanto en la fabricación como en la caracterización de estos materiales y se intenta hacer un resumen sobre las propiedades que pueden dar pauta para armar el rompecabezas sobre origen de la superconductividad en estos materiales. Se detalla el caso particular de la familia 1111 de los oxipnictogenos, que es la familia sobre el que nuestro grupo ha estado trabajando.

Nanoestructuras Laminares: Síntesis, Caracterización, Teoría y Aplicaciones

Florentino López-Urías

División de Materiales Avanzados,
Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica (IPICYT), Camino a la presa San José 2055,
Col. Lomas 4a sección, 78216 San Luis Potosí S.L.P., México.

Uno de los más importantes prototipos de materiales laminares es el grafeno, el cual consiste en un perfecto sistema bidimensional con un solo átomo de espesor. Este se compone de una estructura hexagonal (*honeycomb*) donde sus átomos están triplemente coordinados. Además del grafeno, en la última década, nuevos materiales laminares de una capa han sido sintetizados tales como calcogenuros de metales de transición, compuestos semiconductores III-V entre otros. Estudios teóricos y experimentales han probado que las propiedades físico-químicas de los sistemas laminares son fuertemente sensibles con el número de capas y la estructura, por ejemplo multicapas y el bulto (número infinito de capas) de WS_2 exhiben un gap indirecto mientras que la monocapa de WS_2 presenta un gap directo, este resultado tiene repercusiones importantes en las propiedades optoelectrónicas. En la presente plática, se revisan los últimos avances en la síntesis, caracterización, investigaciones teóricas y algunas aplicaciones de sistemas laminares tales como: grafeno, calcogenuros de metales de transición (MoS_2, WS_2, NbS_2, WSe_2) y compuestos semiconductores III-V (GaN, AlN, BAs). Mediante cálculos de primeros principios, se abordarán las propiedades electrónicas, magnéticas, y estructurales de diversas nanoestructuras (nanotubos, nanocintas, monocapas, agregados triangulares y hexagonales). Se discutirá la fotoluminiscencia en monocapas de WS_2, dopaje con silicio, nitrógeno y berilio en grafeno. Además se presentarán resultados sobre fotosensores basados en monocapas de WS_2 y concretos reforzados con nanotubos de carbono dopados con nitrógeno.

[1] F. López-Urías, A. L. Elías, N. Perea-López, H. R. Gutiérrez, M. Terrones, H. Terrones. Electronic, Magnetic, Optical, and Edge-Reactivity Properties of Semiconducting and Metallic WS_2 Nanoribbons. 2D-MATERIALS 2, 015002 (2015).
[2] H. R. Gutiérrez, N. Perea-López, A. L. Elías, A. Berkdemir, B. Wang, R. Lu, F. López-Urías, V. H. Crespi, H. Terrones, M. Terrones. Extraordinay Room-Temperature Photoluminiscence in WS_2 Monolayers. NANOLETTERS 13 (8), 3447 (2013).
[3] F. López-Urías, M. Terrones, H. Terrones. Beryllium Doping Graphene, Graphene-Nanoribbons, C_{60}-fullerene, and Carbon Nanotubes. CARBON 84, 317 (2015).
[4] R. Lv, M. C. dos Santos, C. Antonelli, S. Feng, K. Fujisawa, A. Berkdemir, R. Cruz-Silva, A. L. Elías, N. Perea-Lopez, F. López-Urías, H. Terrones, M. Terrones. Large-Area Si-Doped Graphene: Controllable Synthesis and Enhanced Molecular Sensing. ADVANCED MATERIALS 26, 7593 (2014).
[5] F. López-Urías, Lv. Ruitao, H. Terrones, M. Terrones. *CHAPTER 9- Doped Graphene: Theory, Synthesis, Characterization, and Applications,* pp 183-207. Wiley Book: Graphene Chemistry: Theoretical Perspectives 2013.
[6] E. Gracia-Espino, F. López-Urías, Y.A. Kim, T. Hayashi, H. Muramatsu, H. Terrones, M. Endo, M. Terrones and M.S. Dresselhaus. CHAPTER 2.2- *Novel carbon based nanomaterials: graphene and graphitic nanoribbons* pp. 61-87. Elsevier Book: Handbook of Advanced Ceramics 2013.
[7] M. Martínez-Alanis, F. López-Urías. Efficient Reinforcement of Concretes Enriched with Nitrogen-Doped and Oxygen-Functionalized Carbon Nanotubes. Submitted to CEMENT & CONCRETE COMPOSITES (2015).

Generación de segundo armónico en materiales nanoestructurados

**Luis Mochán Backal[1], Irina Solís-Mora[1],
Bernardo S. Medoza[2] y Guillermo P. Ortíz[3]**

[1]Instituto de Ciencias Físicas, UNAM, Cuernavaca, Morelos, México.
[2]Centro de Investigaciones en Óptica, León, Guanajuato, México.
[3]FCENA, Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes, Argentina.

La suceptibilidad dipolar no lineal de segundo orden es un tensor de tercer rango responsable de la generación no lineal del segundo armónico óptico (GSA). Dicho tensor se anula en el seno de materiales centrosimétricos debido a las reglas de selección. Sin embargo, en interfaces la centrosimétría se pierde y una polarización no lineal intensa puede ser inducida en su vecindad [1]. Es por ello que nanopartículas podrían ser fuente de señales de SH intensas a pesar de estar compuestas de materiales centrosimétricos, dada su alta razón superficie-volumen. Desafortunadamente, para geometrías simples en que la forma misma de las nanopartículas es centrosimétrica, como en el caso de nanoesferas, o cuando la orientación de las nanopartículas es azaroza, las contribuciones de distintas partes de las interfaces se cancelan entre sí, dejando exclusivamente una contribución de carácter cuadrupolar [2]. La naturaleza cuadrupolar del SA radiado por arreglos de nanopartículas ha sido verificado experimentalmente y se han desarrollado técnicas para incrementar su señal varios órdenes de magnitud [3].

En este trabajo estudiamos la GSA producida por un arreglo ordenado de nanopartículas hechas de materiales centrosimétricos pero con una geometría no centrosimétrica, para la cual las distintas contribuciones no se cancelan mutuamente. Para ello, extendemos un formalismo muy eficiente previamente desarrollado para obtener la respuesta dieléctrica macroscópica de materiales nanoestrucurados de geometría y composición arbitraria [4]. Este formalismo emplea la recursión de Haydock para obtener una base en que la respuesta microscópica se representa como una matriz tridiagonal en la cual la respuesta macroscópica puede identificarse fácilmente. Adicionalmente, éste método conduce a un conjunto de estados de Haydock que permiten el cálculo del campo microscópico. Como éste tiene muy rápidas variaciones a través de ls superficie de las nanopartículas, produce una GSA apreciable que calculamos empleando el modelo de dipolium [1].

Nuestros resultados numéricos confirman que materiales nanoestructurados hechos de nanopartículas o nanocavidades con geometrías no centrosimétricas son fuente de una GSA que escala con la razón superficie-volumen. Esto permite diseñar novedosas fuentes de segundo armónico, tal y como fibras ópticas no lineales con empatamiento de fase fabricadas con materiales ordinarios pero nanoestructuradas.

Bibliografía

1. B.S. Mendoza and W.L. Mochán, Phys. Rev. B 53, 4999 (1996).
2. W.L. Mochán et al. Phys. Rev. B 68, 085318 (2003).
3. P. Figliozzi et al. Phys. Rev. Lett. 94, 047401 (2005).
4. W.L. Mochán et al., Optics Express 18, 22119-22127 (2010).

Análisis termogravimétríco en la síntesis de la perovskita doble Sr_2FeMoO_6

O. Navarro, [a] R. Morales-Estrella[b]

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

[b] Instituto de Investigación en Metalurgia y Materiales, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo

Santiago Tapia 403, Centro, C.P. 58000, Morelia, Michoacán, México.

E-mail: rmorales@umich.mx

Está bien establecido que la perovskita dobles tipo Sr_2FeMoO_6 presenta magnetoresistencia colosal a temperatura ambiente debido a su ordenamiento catiónico. Las estructuras de las perovskitas dobles son muy complejas y es de esperarse que su ordenamiento sea muy sutil a las de condiciones termodinámicas y transporte de masa; en consecuencia, la posición cristalográfica de los cationes de Fe y Mo puede intercambiarse conduciendo a un desorden cristalográfico. En la presente plática se resumirá la síntesis de la perovskita doble tipo Sr_2FeMoO_6 por la ruta de reacciones sólido-gas usando una balanza termogravimétrica de alta precisión. El reto de esta ruta de procesamiento fue optimizar los parámetros de proceso, en especial la concentración de hidrogeno como gas reductor, para obtener una estructura altamente ordenada. El refinamiento Rietveld de los patrones de difracción de rayos-X confirmo la formación de la fase Sr_2FeMoO_6. La técnica de termogravimetría reveló que el fenómeno de transporte que gobierna la formación de esta perovskita doble es la difusión en estado sólido.

Transiciones de fase en fluidos cuánticos confinados en cristales artificiales de luz

Rosario Paredes Gutiérrez

Instituto de Física
Universidad Nacional Autónoma de México

Se estudian transiciones de fase, a temperaturas cero y finitas, en gases ultrafríos confinados en cristales artificiales de luz, también conocidos como redes ópticas. Para tal efecto se consideran las características esenciales de sistemas a temperaturas del orden de nano Kelvin y en ese contexto se propone el Hamiltoniano que los representa. Se analiza la existencia de fases superfluida y aislante para fermiones y bosones. Se estudia adicionalmente el efecto de redes desordenadas en la dinámica del gas ultrafrío en el caso de bosones. Se describe el paralelismo entre las fases predichas y la localización de Anderson y el estado superconductor de BCS.

Estabilidad de nanoclusters de Mg_xAl_y (x+y=2-8) y de la adsorción de hidrógeno

Guillermo Ramírez Galicia

División de Estudios de Posgrado, Universidad del Papaloapan,
Circuito Central 200, Parque Industrial, 68301 Tuxtepec, Oaxaca, México

En la actualidad los combustibles fósiles han dejado de ser una buena opción como fuente de energía. La premisa "*Sí a las energías alternas, No a los combustibles fósiles*" ha tomado importancia debido a que, estos últimos, son recursos no renovables y causantes de la emisión de gases que inducen el efecto invernadero. Una de las energías alternas, es el hidrógeno que es viable y es una fuente de energía limpia, abundante, no nociva para el medio ambiente y tres veces más eficiente que el petróleo. Sin embargo, para considerar al hidrógeno como un reemplazo de la gasolina es necesario almacenarlo. El almacenamiento de hidrógeno en depósitos estacionarios como gas comprimido o líquido criogénico es factible, pero en vehículos de transporte esas alternativas involucran volúmenes y pesos excesivos comparados con los tanques de gasolina. Por lo que se ha explorado el almacenamiento en estado sólido, mediante la formación de hidruros a partir de la adsorción de hidrógeno en nanoclusters. En este trabajo se investiga la estabilidad estructural mediante cálculos de la energía total dentro de la teoría del funcional de la densidad (DFT). La energía de correlación-intercambio se trató dentro de la aproximación del gradiente generalizado (GGA) con el funcional de Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) utilizando una función doble zeta (dgdzvp) en el programa Gaussian 09. Se estudiaron diferentes nanoclusters del tipo Mg_xAl_y con $0<x< 8$, $0<y<8$ y $x+y=1$ a 8 y los resultados muestran que los compuestos con mayor cantidad de aluminio son más estables que los nanoclusters que presentan una menor cantidad de este elemento en su estructura. Finalmente, la adsorción de hidrógeno a los diferentes nanoclusters muestran que es posible formar nH_2@Mg3Al4 con n=0-8, con temperaturas de vibración alrededor de 410 K.

Palabras clave: Nanoclusters de MgAl, cálculos DFT, adsorción de hidrógeno.

Self-similar charge transport in graphene

Isaac Rodríguez-Vargas

Unidad Académica de Física,
Universidad Autónoma de Zacatecas

Self-similarity is a fascinating property, since it appears in multiple aspects of nature, from the distribution and abundance of species, temporal occurrence of earthquakes to the growth of complex networks and trees. From the technological standpoint, self-similarity can also be exploited to produce useful devices. Particularly, photoconductive fractal antennas show an efficient multiband emission of terahertz radiation owing to the self-similarity of the fractal structure. Within this context, solid-state aperiodic structures are not the exception, and for various decades it was claimed that physical properties like the transmittance show self-similar characteristics. However, as far as we can see, self-similarity has been left to a matter of visual perception, and rarely the scaling factors that rule the self-similar patterns are given. In this talk, we present our results of the transmission and transport properties in self-similar graphene structures. Particularly, we show that it is possible to obtain scaling expressions for the transmittance and conductance, and hence self-similarity. We also analyse the different conditions that have to be fulfil in order to get self-similarity as well as the possible experimental setups that could help to unveil this outstanding property.

Estudio teórico de las propiedades electrónicas y estructurales del TiO_2 dopado con tierras raras

Alberto Rubio Ponce

Universidad Autónoma Metropolitana Unidad Iztapalapa

El dióxido de titanio (TiO_2) es un semiconductor con propiedades electrónicas muy particulares, su banda de energía prohibida es de aproximadamente 3.0 eV, razón por la cual se utiliza como fotocatalizador, en celdas solares, para la producción de hidrógeno, para purificar y desodorizar el aire y las aguas residuales, es un material con un gran potencial para resolver problemas ambientales.

En base a su estructura cristalina y sus propiedades físicas, el TiO_2 es un huésped muy promisorio dada su sensibilidad luminiscente con los iones de tierras raras y su estabilidad química, adicionalmente es un material de muy bajo costo.

En el presente trabajo, se muestran estudios de los cambios en la estructura de bandas electrónicas del TiO_2 dopado con tierras raras. Los cálculos se llevaron a cabo en el marco de la teoría del funcional de la densidad utilizando el método de ondas planas linealizadas y aumentadas con potencial completo, con la aproximación de gradiente generalizado para la energía de intercambio y correlación, implementada en el código de computo WIEN2k.

Nanoestructuras magnéticas en superficies de nitruro de galio

Noboru Takeuchi

Centro de Nanociencias y Nanotecnología
Universidad Nacional Autónoma de México
Ensenada, Baja California, México

El nitruro de galio es un semiconductor de brecha prohibida ancha y directa usado muy ampliamente en aplicaciones optoelectrónicas. En particular, su superficie (0001) crecida en condiciones ricas en galio es muy importante, porque la mayoría de los dispositivos comerciales se fabrican sobre ella. A pesar de ello, su estructura atómica no se conoce en detalle. En este trabajo, presentaremos estudios de primeros principios y microscopía de efecto túnel para estudiar las propiedades estructurales y electrónicas de la superficie GaN(0001) rica en galio. También presentaremos estudios de cómo podemos modificar sus propiedades con el depósito de metales, resultado en la formación de nanoestructuras magnéticas, con propiedades que varían dependiendo de la cantidad de material depositado.

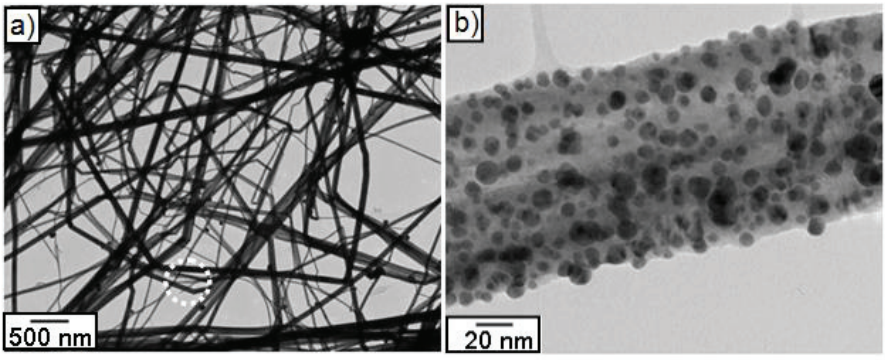
Trabajo en colaboración con el Prof. Art Smith de Ohio University. Se agradece apoyo de DGAPA-UNAM y Conacyt a través de los proyectos IN103512-3 y 164485 respectivamente.

Síntesis de polímeros dopados de nanopartículas de plata y sus aplicaciones

Gonzalo Viramontes Gamboa[a], Armando López Miranda[a], Alejandro López Valdivieso[b]

[a] Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, México
[b] Universidad Autónoma de San Luis Potosí, México

México sigue siendo el principal productor de plata a nivel global, y en su territorio se encuentran las mayores reservas de plata de este elemento. Industrialmente, la extracción de Ag de las menas se realiza mediante un proceso de lixiviación química en el que la plata termina ligada a iones cianuro formando el complejo $Ag(CN)_2^-$, por lo que es este complejo el precursor más barato y abundante en el mercado para sintetizar cualquier nanoestructura de plata. Paradójicamente y a pesar de esta ventaja, el estudio de la síntesis química de nanoestructuras de plata en medio acuosos cianurado es prácticamente inexistente en la literatura. Dado que las nanoestructuras de plata han encontrado ya aplicación práctica y real, principalmente en aplicaciones biológicas como agentes antibacteriales, para cuestiones de aplicaciones y desarrollo de productos tecnológicos, es de suma importancia producirlas a costos bajos. Como parte de la investigación aquí reportada, se demuestra que utilizando $Ag(CN)_2^-$ como precursor, y sulfito de sodio, Na_2SO_3, como reductor, que también es uno de los reductores más baratos del mercado, es posible sintetizar no solo nanopartículas, sino también polímeros dopados de nanopartículas, que pueden llegar a las decenas de centímetros de largo. Estas estructuras se muestran en la figura siguiente.



Estas nanoestructuras tienen también propiedades bactericidas en bacterias como la Lactobacillus Casei Shirota, Escherichia Coli y Dermatítís Atópica, siendo capaz de eliminar por completo las dos últimas.

Contribuciones orales

Transport properties in $Al_xGa_{1-x}As$ delta-MIGFET transistor under Contact Voltage and Aluminum Concentration effects

O. Oubram[a], I. Rodriguez-Vargas[b], L.M. Gaggero-Sager[c], L. Cisneros-Villalobos[a], M. Abatal[d], I.E. Castañeda[e]

[a] *Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos*
Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209, Cuernavaca, Morelos, México.
[b] *Unidad Académica de Física Universidad Autónoma de Zacatecas*
Calzada Solidaridad, Esquina con Paseo la Bufa S/N, 98060 Zacatecas, Zac., México.
[c] *Facultad de Ciencias Universidad Autónoma del Estado de Morelos*
Av. Universidad, 1001, Col. Chamilpa Cuernavaca, Morelos 62210, México.
[d] *Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma del Carmen*
,24180, Ciudad del Carmen, Campeche, México.
[e] *Universidad Tecnológica Del Estado de Zacatecas,*
Carretera Zacatecas, Cd. Cuauhtmoc, Km. 5 Ejido Cieneguitas Guadalupe, Zac., México.
E-mail: oubram@uaem.mx

In the effective mass approximation, we have theoretically investigated the subband structure of delta-MIGFET transistor in $Al_xGa_{1-x}As$ by solving the Schrodinger. Both the mobility and conductivity are calculated as dependent on the Aluminum molar fraction and voltage contact. In this work, special consideration is taken into when the values of the Al molar fraction $x<0.45$, and the ternary alloy is as a direct gap material. Our results show that the mobility and conductivity enhanced about 10% when the values of the Al molar fraction is $x=0.2$ and voltage contact $V_{C1} = 750$ meV.

The shape of potential profile and the subband energy are changed as dependent on the Aluminum concentration. Such results are useful in applications in temperature-insensitive devices.

Obtención de nanotubos de carbono a partir de butanol, utilizando el método de CVD

C. J. Gutiérrez García, [a] F. G. Granados Martínez, [a] F. Paz Zavala, [a] L. Domratcheva Lvova, [a] U. Camacho Martínez, [a] L. García González, [b] Ma. De L. Mondragón Sánchez [c]

[a] *Facultad de Ingeniería Mecánica, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
Gral. Francisco J. Múgica S/N, Felicitas del Río, 58030 Morelia, Mich., México.
[b] *Centro de Investigaciones en Micro y Nanotecnología de la Universidad Veracruzana*
Boca del Río, Veracruz, México
[c] *Instituto Tecnológico de Morelia*
Morelia, Mich., México
E-mail: grana2francisco@gmail.com

Diversos estudios de los nanotubos de carbono (CNTs), se han realizado por las propiedades químicas y físicas de las que dispone este material [1]. Entre los métodos de síntesis de CNTs más versátiles, se utiliza principalmente la Deposición Química de Vapor (CVD) por la gran cantidad y calidad de CNTs que se obtienen [2]. Actualmente se busca disminuir los riesgos a la salud y al ambiente cuando se trabaja con procesos químicos [3]. En el presente trabajo se utilizó butanol para obtener nanotubos de carbono en un reactor CVD, sin utilizar precursores organometálicos como fuente de catalizador.

El reactor consistió en un tubo de cuarzo con un diámetro de 0.0254 m y 0.6m de largo; en su interior se colocó un tubo de acero inoxidable AISI 304 de 0.019 m de diámetro. Se utilizó un horno programado a temperaturas de 800°C y 850°C para la síntesis. Como precursor orgánico se utilizó butanol. Durante la síntesis, se mantuvo un flujo constante de argón de 80 ml/min; con la función de evitar el proceso de combustión y de transportar al precursor a la zona de reacción. Se utilizaron tiempos de proceso de 1 y 0.5 hr.

Las muestras se analizaron a través de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) y Espectroscopía de Energía Dispersa (EDS). Se observó que las muestras de CNTs, obtenidos a menor temperatura, tuvieron diámetros que van desde 55 hasta 230 nm, con algunos productos secundarios. Las muestras sintetizadas a mayor temperatura mostraron diámetros similares, pero se encontró un incremento en las impurezas. El análisis EDS de los elementos presentes en las muestras, mostró una cantidad cercana al 100% de carbono en los CNTs obtenidos a 800ºC.

Se agradece el apoyo a esta investigación a los proyectos CIC de la UMSNH y de Redes de Colaboración "Materiales Nanoestructurados" de PRODEP.

Referencias

[1] Endo, M. (2012). Carbon nanotube research: Past and future. Japanese Journal of Applied Physics, 51(**4R**), 040001.
[2] Kumar, M., Ando, Y. (2010). Chemical vapor deposition of carbon nanotubes: a review on growth mechanism and mass production. Journal of nanoscience and nanotechnology, 10(**6**), 3739-3758.
[3] Ramírez, M., García, A., Cordero, M. (2004). La química verde en México. Gaceta ecológica (**72**), 35-44.

Síntesis de nanotubos de carbono a partir de hexano, por el método de CVD

E. E. Gama Ortega, [a] J.J. Contreras Navarrete, [a] F. G. Granados Martínez, [a] L. Domratcheva Lvova, [a,b] N. Flores Ramírez [b], L. García González, [c] Ma. De L. Mondragón Sánchez [d]

[a]*Facultad de Ingeniería Mecánica, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
Gral. Francisco J. Múgica S/N, Felicitas del Río, 58030 Morelia, Mich., México.
[b]*Facultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
Gral. Francisco J. Múgica S/N, Felicitas del Río, 58030 Morelia, Mich., México.
[c]*Centro de Investigaciones en Micro y Nanotecnología de la Universidad Veracruzana*
Boca del Río, Veracruz, México
[d]*Instituto Tecnológico de Morelia*
Av. Tecnológico 1500, Lomas de Santiaguito, 58020 Morelia, Mich., México.
E-mail: josecontrerasna@gmail.com

Un gran número de estudios de los nanotubos de carbono (CNTs), han sido realizados para analizar las propiedades y características químicas, físicas y mecánicas con las que cuenta este material [1]. Dentro de los métodos existentes para sintetizar los nanotubos de carbono (CNTs): *arco eléctrico, ablasión laser y deposición química de vapor (CVD)* por sus siglas en inglés, se empleó este último debido al gran porcentaje de obtención de CNTs así como la calidad de los mismos [2]. Lo que se pretende en la actualidad es minimizar los riesgos de salud que esto implica y además ser amigables con el medio ambiente. En la presente investigación fue empleado hexano para obtener CNTs en un reactor CVD.

El proceso consistió en emplear un tubo de cuarzo con diámetro de 0.0254 m y 0.6 m de largo como reactor. Dentro del tubo de cuarzo se colocó un tubo de acero inoxidable AISI 304 de 0.019 m de diámetro que fungió como catalizador. Fue empleado un horno con temperaturas de 800°C y 850°C para la síntesis, el hexano se empleó como precursor orgánico. Se mantuvo un flujo constante de argón de 80 ml/min; con la finalidad de evitar la combustión y transportar al precursor a la zona de reacción. Los tiempos del proceso van desde 0.5 a 1 hora.

Las muestras obtenidas fueron analizadas a través de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM) y Espectroscopía de Energía Dispersa (EDS). Los CNTs, obtenidos a menor temperatura, presentaron mejor calidad y menor porcentaje de impurezas. Los diámetros son desde 50 hasta 130 nm. El análisis EDS de los elementos presentes, mostró porcentajes atómicos de carbono 95.32%, de hierro 4.5% y de cromo 0.18%, no se observó presencia de oxígeno.

Con el agradecimiento especial por el apoyo a este investigación a los proyectos CIC de la UMSNH y de Redes de Colaboración “Materiales Nanoestructurados” de PRODEP(SEP).

Referencias

[1] Endo, M. (2012). Carbon nanotube research: Past and future. Japanese Journal of Applied Physics, 51(**4R**), 040001.
[2] Kumar, M., Ando, Y. (2010). Chemical vapor deposition of carbon nanotubes: a review on growth mechanism and mass production. Journal of nanoscience and nanotechnology, 10(**6**), 3739-3758.

Simulación Molecular del Sistema PMMA/Li^+ y PMMA/Fe_2O_3 para Aplicación en Vidrios Electrocrómicos

C.V. Paz, [a] S.R. Vásquez, [a] M.G. Pineda, [a] N. Flores [b]

[a] *Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo* Apartado Postal 58060, Morelia, Michoacán, México
[b] *Facultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo,* Avenida Francisco J. Mújica S/N Ciudad Universitaria, Morelia, Michoacán, 58060, México.
E-mail: salomon_vg@yahoo.com

Los vidrios electrocrómicos (VE) empleados en ventanas de edificios y autos aportan ventajas en el ahorro de energía, por medio de la mediante inversión de color a través de un estímulo eléctrico [1,2]. Actualmente existen VE como sistemas de obstrucción de radiación y energía solar. Sin embargo su costo es una limitante, debido a que usa un gas que debe permanecer con un sellado hermético [3,4]. Así, en este trabajo se plante la realización de VE los cuales tendrán como agente dopante al Litio (Li^+) y Hematita (Fe_2O_3) en una matriz de Polimetacrilato de metilo (PMMA). Para este análisis, se empleó un programa de simulación molecular denominado Materials Studio, para realizar una Simulación Mecánica (MM) y Dinámica Molecular (MD) del sistema PMMA-Agente Dopante. Se inició con una estructura de PMMA de 20 monómeros a 25°C y 1 atm dando una energía total de 446 Kcal/mol. Adicionalmente se realizó la estructura del Li^+ y Fe_2O_3, a iguales condiciones de temperatura y presión, resultando una energía total de -13.47 y -16561.47 Kcal/mol respectivamente. Tres cadenas de PMMA presentaron grandes fuerzas asociativas intra- e intermoleculares por puente de hidrogeno (PH) cuando se realizó un análisis por MD. A estas tres estructuras se adicionó 20% en peso de Li^+, el cual presentó una apropiada dispersión sobre la matriz, promoviendo un incremento de la movilidad respecto al PMMA por una asociación con los grupos funcionales laterales, especialmente del grupo C-O-C. Esto por medio de interacciones de tipo Van der Waals (VW), iónicas (FI) y metálicas (FM). Adicionalmente, permanecen asociaciones inter-moleculares por PH entre cadenas de PMMA. Por otro lado, cuando a las cadenas de PMMA le son adicionadas moléculas de Fe_2O_3 al 20% en peso, estas presentan una alta dispersión, con una nueva asociación por PH, adicional a la atracciones por VW, FI y FM existente en para el caso del Li^+. Particularmente, en este sistema se observa que las moléculas de Fe_2O_3, generan una movilidad de los grupos laterales menor que la proporcionada por el Li^+, pero mayor respecto al PMMA solo.

Referencias

[1] Sekhar, S.C. and Lim K. C. (1998). *On the study of energy performance and life cycle cost of smart window*. Energy and Buildings 28(**3**), 307-316.
[2] Hsuan J.C., Chun M.S., Che M.C., Shin K.L. (2011). *The Indoor Thermal Research of the HCRI-BIPV Smart Window*. Energy Procedia 12, 593-600.
[3] Tavares, P.F., Martinsb A.G., Frontinie F. (2014), *Evaluation of electrochromic windows impact in the energy performance of buildings in Mediterranean climates*. Energy Policy 67, 68-81.
[4] Lampert, C.M.*(* 2003*), Large-area smart glass and integrated photovoltaic*s. Solar Energy Materials and Solar Cells 76(**4**), 489-499.

Estudio del comportamiento no-recíproco en líneas de transmisión con arreglos de nanoalambres con perfiles de altura continuos

R. Ramirez-Villegas, [a, b] A. Encinas [a,c], I. Huynen [d], J. De la Torre Medina [b]

[a] *Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí*
Av. Manuel Nava 6, Zona Universitaria, 78290 San Luis Potosí, SLP, México
[b] *Instituto de Investigaciones en Materiales / Unidad Morelia, Universidad Nacional Autónoma de México*
Antigua Carretera a Pátzcuaro # 8701; Morelia, Michoacán, México.
[c] *División de Materiales Avanzados, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A. C., Caminio a la Presa 2055, 78216 San Luis Potosí, SLP, Mexico.*
[d] *Institute of Information and Communications Technologies, Electronics and Applied Mathematics, Universite Catholique de Louvain, Place du Levant 3, B-1348 Louvain-la-Neuve, Bélgica.*

E-mail: ingrossrv@gmail.com.mx

Hoy en día existe un gran interés en el desarrollo de sistemas de tamaño reducido y con funcionalidades múltiples para el procesamiento de señales con longitudes de onda micro- y milimétricas. Recientemente se han propuesto dispositivos planos con estructura de nanocompositos fabricados a base de arreglos de nanoalambres (NAs) magnéticos embebidos en membranas nanoporosas. Por ejemplo, trabajos recientes han reportado dispositivos planos y no recíprocos de micro-ondas como circuladores [1], aisladores [2] y desfasadores [3,4]. Particularmente, se ha aprovechado la influencia de la disposición asimétrica de los NAs bajo la línea de transmisión en aisladores y desfasadores, con la finalidad de inducir comportamientos no-recíprocos en virtud del efecto dirigido en borde [3,4] y de ondas polarizadas circularmente [5]. En este trabajo reportamos cálculos sobre propiedades no-recíprocas de micro-ondas como la aislación y el desfasamiento diferencial en líneas de transmisión cargadas con arreglos de nanoalambres (NAs) presentando perfiles de altura cuasi-continuos. Estas propiedades han sido determinadas manipulando parámetros geométricos de los NAs, tales como su altura con la finalidad de obtener topologías de perfiles cóncavos y convexos. Para este fin se ha desarrollado un modelo generalizado basado en una aproximación de modelo variacional [6], el cual incorpora la influencia de la permitividad dependiente de la altura de los NAs, así como de la memductancia del nanocomposito. El modelo mencionado toma en cuenta la discretización del perfil de alturas bajo la línea de transmisión en donde la altura de los NAs cambia de una zona a otra de manera cuasi-continua. Estos resultados serán de utilidad para el desarrollo de dispositivos de micro-ondas con funcionamiento no-recíprocos optimizados.

References

[1] Gaël Hamoir, Luc Piraux, and Isabelle Huynen, (2013) IEEE Trans. Magn. (**49**), 4261.
[2] Bijoy K. Kuanr, V. Veerakumar, Ryan Marson, Sanjay R. Mishra, R. E. Camley, and Z. Celinski (2009) Appl. Phys. Lett. (**94**), 202505.
[3] J. De la Torre Medina, J. Spiegel, M. Darques, L. Piraux, and I. Huynen, (2010) Appl. Phys. Lett. (**96**), 072508.
[4] Catalina E. Carreón-Gonzólez, Joaquín De La Torre Medina, Luc Piraux, and Armando Encinas (2011) Nano Lett. (**11**), 2023 – 2027.
[5] Vivien Van Kerckhoven, Luc Piraux, and Isabelle Huynen, (2014) Appl. Phys. Lett. (**105**), 183107.
[6] J. Spiegel and I. Huynen, (2009) J. Comput. Theor. Nanosci. (**6**), 2001.

Faraday rotation induced by quasi-particle mass in graphene

S. Hernández-Ortiz, A. Raya
Instituto de Física y Matemáticas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo
Edificio C-3, Ciudad Universitaria, C.P. 58040, Morelia, Mich.
E-mail: sortiz@ifm.umich.mx

Through the Lagrangian of quantum electrodynamics in (2+1)-spacetime dimensions (QED3) for the reducible representation of the Dirac matrices, allowing the appearance of a Haldane mass term, making use of the relativistic Kubo formula we carry out an explicit calculation of the quantized electrical conductivity and demonstrate that the filling factor is a half (in natural units) when the parity symmetry of the Lagrangian is explicitly broken by the mass term [1].

Furthermore, assuming that graphene is radiated with monochromatic light of frequency ω along the perpendicular direction, from the modified Maxwell's equations we derive the angle of the Faraday Rotation due the Induced Mass in graphene (FRIM) for transmitted light [2]. Our findings generalize and complement previously known results reported in literature regarding the light absorption and Faraday problem in graphene from the experimental and theoretical points of view[3].

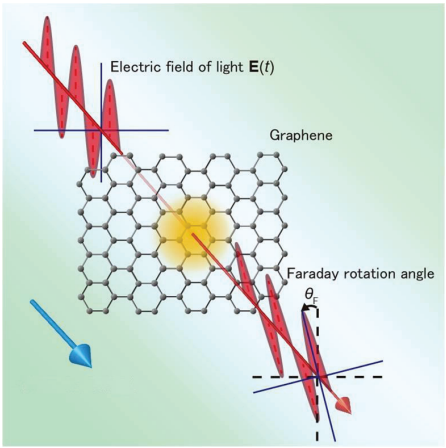


Figure 1: Shows a monochromatic light incident wave of frequency w transverse to a graphene sheet, it is our theoretical arrangement.

References

[1] A. Raya, E. Reyes, *Massive Dirac Fermions and the Zero Field Quantum Hall Effect*, J. Phys. A**41**, 355401, (2008).
[2] S. Hernández, A. Raya, et al., *Work in progress*.
[3] D. Valenzuela, S. Hernández, et al, *Graphene Transparency in weak magnetic fields*, J. Phys. A**48**, 065402 (2015).

Síntesis, estabilidad cristalina y comportamiento eléctrico de una doble perovskita como cátodo para celdas SOFC

J. Alvarado-Flores, [a] I. Espitia-Cabrera, [a] A. Reyes-Rojas [b]

[a] *Facultad de Ingeniería Química, Posgrado, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
Santiago Tapia 403, Morelia, Michoacán, México.
[b] *Centro de investigación en Materiales Avanzados S.C., Laboratorio Nacional de Nanotecnología*
Miguel de Cervantes 120, Complejo Industrial Chihuahua, Chihuahua, México.
E-mail: cedhryck@hotmail.com

Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC), son dispositivos que funcionan en alta temperatura (≈1000°C) y ofrecen posibilidades únicas como fuentes alternas generadoras de energía eléctrica. A diferencia de otro tipo de celdas, presentan varias ventajas debido principalmente al reducido costo de sus materiales (ánodo-cátodo-electrolito), baja sensibilidad a las impurezas presentes en el combustible utilizado (H_2S) y alta eficiencia (60-80%) [1]. Hoy en día, se han realizado importantes esfuerzos en el desarrollo de materiales catódicos para celdas SOFC que funcionen a temperaturas intermedias (IT) en el rango de 500 - 800°C [2]. Esta temperatura, puede reducirse mejorando la reducción electroquímica de oxígeno (O^{-2}). Uno de los principales sistemas catódicos para las celdas SOFC-IT, son las perovskitas de conformación ABO_3 y $A_2B_2O_6$, debido a su característica de ser conductores mixtos iónico-electrónicos (MIEC) [3]. Por otra parte, es bien conocido que el níquel, se utiliza en las celdas SOFC en relación a su alta conductividad eléctrica y excelente actividad electrocatalítica. Por lo tanto, como una alternativa, la doble perovskita $BaSrCoFe_{1-x}Ni_xO_{5.5}$ se puede utilizar con adiciones de Ni y estudiar su relación con las propiedades eléctricas para su posible aplicación en celdas SOFC-IT. La técnica de sol-gel ha ganado un enorme potencial respecto a la ciencia de síntesis de materiales debido a que los problemas que se presentan, por ejemplo, en la molienda (contaminación), son eliminados y los compuestos resultantes presentan mejor distribución metálica aleatoria [4]. En este sentido, los materiales catódicos propuestos en este trabajo se han realizado por el método sol-gel. Esta investigación también considera importante la porosidad del cátodo, por lo tanto, se utilizó alcohol polivinílico (PVA) y grafito como formador de poro. Se han sintetizado a través del método sol-gel y caracterizado por difracción de rayos X (XRD), conductividad eléctrica y coeficiente de expansión térmica (TEC), nuevos compósitos de estructura doble perovskita tipo $BaSrCoFe_{1-x}Ni_xO_{5.5}$ con adición de Ni en solución solida donde x = 0.025, 0.05, 0.075, 0.1 y 0.2, como cátodos alternativos para celdas SOFC-IT. Se confirma por XRD la formación de la fase en cada uno de los cátodos tipo $BaSrCoFe_{1-x}Ni_xO_{5.5}$, observándose que las muestras tienen una estructura doble perovskita tetragonal. Se observa que la conductividad eléctrica aumenta con el incremento de la temperatura entre 350°C - 470°C, y entonces disminuye debido a la pérdida de oxígeno en la red, lo cual causa las diferencias en la conductividad. Se obtuvo un comportamiento semiconductor en todas las composiciones. La determinación del TEC, mostró una dependencia lineal inversamente proporcional a la concentración de Ni. Nuestros resultados de conductividad eléctrica, porosidad, y TEC nos conducen a la conclusión de que los cátodos entre 0.1 y 0.2 de Ni tienen la mayor posibilidad para aplicarse en las celdas tipo SOFC-IT.

Referencias

[1] Howell,T. (2013). *A_2MgMoO_6 for use as sulfur tolerant anodes*. Journal of Power Sources **(231)**, 279-284.
[2] Patil, B. (2014). *Synthesis of PdO-NiO-SDC for Anode of IT-SOFC.* Energy Procedia **(54)**, 669-679.
[3] Wang, F. (2014). *Effect of Nb doping on the chemical stability of BSCF.* Solid State Ionics **(262)**, 719-723.
[4] Reisfeld, R. (2006). *Innovative materials based on sol–gel technology*. Optical Materials **(28)**, 64-70.

Filtro de micro-ondas multifuncional para procesamiento de señales basado en arreglos de nanoalambres magnéticos bi-estables

R. Ramírez Villegas, [a, b] A. Encinas, [b, c] I. Huynen, [d] L. Piraux, [e] J. De La Torre Medina [a]

[a] *Instituto de Investigaciones en Materiales/Unidad Morelia, Universidad Nacional Autónoma de México,* Antigua Carretera a Pátzcuaro #8701, C.P. 58190; Morelia, Michoacán, México.
[b] *Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí,* Av. Manuel Nava 6, Zona Universitaria, 78290 San Luis Potosí, SLP, México.
[c] *División de Materiales Avanzados, Instituto Potosino de Investigación Científica y Tecnológica A. C., Caminio a la Presa 2055, 78216 San Luis Potosí, SLP, Mexico.*
[d] *Institute of Information and Communications Technologies, Electronics and Applied Mathematics, Universite Catholique de Louvain, Place du Levant 3, B-1348 Louvain-la-Neuve, Bélgica.*
[e] *Institute of Condensed Matter and Nanosciences, Université catholique de Louvain, Place Croix du Sud 1, 1348 Louvain-la-Neuve, Bélgica.*
E-mail: delatorre@iim.unam.mx

Con la creciente demanda de sistemas de comunicación inalámbricos, existe una necesidad e interés crecientes de para el desarrollo de nuevos materiales para ser aprovechados para dispositivos planos capaces de realizar procesamiento de señales micro-ondas [1,2]. En estudios recientes, el concepto de dispositivos de micro-ondas configurables bajo campo magnético ha sido desarrollado como una alternativa basada en partículas magnéticas bi-estables, las cuales tiene el potencial de permitir reconfigurar sus propiedades magnéticas y de absorción de micro-ondas mediante el ciclado en campo [3] y la configuración magnética [4,5]. En el presente estudio hemos demostrado que las propiedades de absorción de micro-ondas de arreglos de nanoalambres magnéticos bi-estables pueden ser configuradas de manera reversible por medio de un campo magnético en virtud de una única o doble absorción de resonancia ferromagnética. Estas características dan lugar a un filtro de micro-ondas multifuncional, el cual es capaz de funcionar como un filtro de banda de paso o un filtro de banda prohibida en donde el paso de una función a la otra tiene lugar al aplicar un campo magnético entre un campo de retorno y campo cero de manera que la configuración magnética de un estado no-saturado permanezca estable. Así mismo, estos sistemas son capaces de imitar las funcionalidades de filtros de paso bajo y paso alto en el estado de saturación magnética. Estas características hacen de los arreglos de nanoalambres bi-estables bastante atractivos para dispositivos de micro-ondas multifuncionales, planos y compactos. Con el objetivo de precedir las funcionalidades de estos dispositivos se ha propuesto un modelo de campo medio para la permeabilidad efectiva, el cual muestra un buen acuerdo con los resultados experimentales de las propiedades de absorción de micro-ondas en estados saturados y no-saturados.

Referencias

[1] M. Golio and J. Golio, (2008). *The RF and Microwave Handbook: RF and Microwave Circuits, Measurements and Modeling*, 2nd Edition, Eds., CRC Press.
[2] V. G. Harris, (2012) IEEE Trans. Magn. (**48**), 1075.
[3] A. Encinas, L. Vila, M. Darques, J.-M. George, L. Piraux, (2007) Nanotechnology (**18**), 065705.
[4] Y. Nozaki, K. Tateishi, S.-I. Taharazako, S. Yoshimura, and K. Matsuyama, (2009) J. Appl. Phys. (**105**), 013911.
[5] J. De la Torre Medina, L. Piraux, J. M. Olais Govea, and A. Encinas, (2010) Phys. Rev. B (**81**), 144411.

Fabricación de espumas metálicas desde el estado sólido

I. Alfonso, [a] G. González, [a] L. Béjar, [b] H. Gutiérrez, [b] G. Lara, [a] I.A. Figueroa, [a]

[a] *Instituto de Investigaciones en Materiales. Universidad Nacional Autónoma de México.*
Circuito Exterior SN. Ciudad Universitaria. CP. 04510. Del. Coyoacán, México, DF. México.
[b] *Facultad de Ingeniería Mecánica. Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.* Edificio W.
Ciudad Universitaria, C.P. 58000, Morelia, Michoacán, México.
E-mail: ialfonso@unam.mx

Los materiales porosos o espumas metálicas son de gran importancia debido a la combinación de propiedades únicas que presentan, sobre todo su baja densidad, manteniendo propiedades mecánicas adecuadas para un gran número de aplicaciones, tales como intercambiadores de calor y energía, absorbedores del sonido y filtros altamente resistentes al desgaste, además de para aplicaciones estructurales, sobre todo en la industria del transporte. Sus métodos de fabricación son variados, incluyendo técnicas en estado sólido, líquido o gaseoso, destacándose la infiltración, la inyección de gas en metal fundido, el espumado y la metalurgia de polvos, que es el más conocido en estado sólido [1]. En el presente trabajo se detalla un nuevo método de fabricación en estado sólido, que consiste en aplicar sobre-tratamientos térmicos a aleaciones de aluminio, que como requisito deben tener un alto contenido de segundas fases. El procedimiento se lleva a cabo a temperaturas superiores a las utilizadas para los tratamientos térmicos de solubilización de estas aleaciones, lo cual es primeramente necesario determinar. El aumento de la temperatura provoca la fusión localizada de segundas fases, originando espumas con un alto grado de porosidad. Se muestran ejemplos de espumas fabricadas a partir de aleaciones Al-Si-Cu-Mg y Al-Cu-Fe, con porosidades que pueden alcanzar el 70 %, con tamaños de poros de entre 10 y 500 μm, estando o no interconectados. Se utilizó análisis térmico diferencial (TGA) para determinar la temperatura de tratamiento térmico a emplear, y microscopías óptica y electrónica de barrido para el estudio de los sistemas porosos.

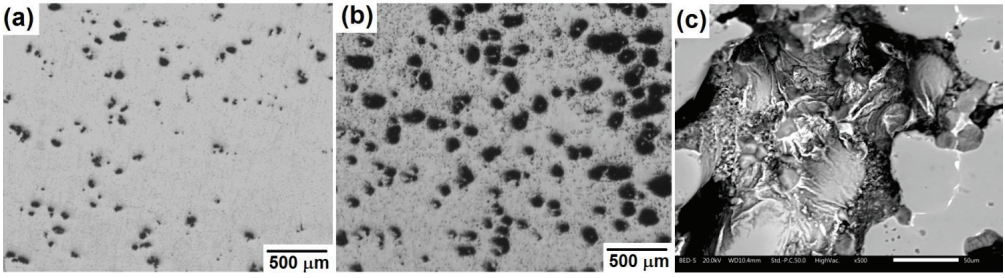


Figura 1: Espumas metálicas con porosidades de (a) 5 y (b) 30 %, producidas a partir de la fusión localizada de segundas fases en aleaciones Al-Si-Cu-Mg; y (c) muestra de un poro originado por la fusión localizada.

Referencias

[1] J. Banhart (2001). *Manufacture, characterization and application of cellular metals and metal foams*. Prog. Mater. Sci. (**46**), 559–632.

Análisis por HRTEM de aleaciones base Ti para aplicaciones biomédicas

C. Aguilar, [a] A. Medina, [b] L. Béjar, [c] I. Alfonso, [d] C. Salvo, [a] P. Guzmán, [a]

[a] *Departamento de Ingeniería Metalúrgica y materiales, Universidad Técnica Federico Santa María* Av. España 1680, Valparaíso, Chile
[b] *UMSNH. Instituto de Investigación en Metalurgia y Materiales. Edificio U. Ciudad Universitaria.* C.P. 58000. Morelia, Michoacán, México
[c] *UMSNH. Facultad de Ingeniería Mecánica. Edificio W. Ciudad Universitaria.* C.P. 58000. Morelia, Michoacán, México
[d] UNAM, Campus Morelia, Antigua carretera a Pátzcuaro 8701, Morelia, Mich., 58190.
e-mail: ariosto@umich.mx

Los seres humanos presentan problemas degenerativos en los huesos, lo que conlleva a la degradación de sus propiedades mecánicas [1]. Las aleaciones de Ti son utilizadas debido a su gran compatibilidad y resistencia a la corrosión en conjunto con su baja densidad y un módulo de elasticidad muy similar a la del hueso humano [2]. En este trabajo se presentan los resultados obtenidos al caracterizar por microscopía electrónica de transmisión de alta resolución (HRTEM) polvos de Ti-2Nb-4Ta-xMn sintetizados mediante metalurgia de polvos, en dónde se varío el contenido de Mn (2, 4, 6% en peso). La figura 1 muestra una imagen de HRTEM de polvos sinterizados con 2% de Mn a) Imagen de HRTEM de polvos de la aleación Ti-2Nb-4Ta-2Mn dónde se aprecia la formación de policristales en diferentes direcciones, con tamaños menores a los 10 nm y con morfología circular, b) transformada inversa de la rápida transformada de Fourier (IFFT) dónde se precia la distancia interplanar de los diferentes cristales formados, mostrando distancias de 0.234 nm y 0.224 nm, c) rápida transformada de Fourier (FFT) en dónde se determinaron la formación de las fases de Tiα yTi β en los planos (011) y (101) respectivamente. Los resultados muestran que no hubo formación de intermetálicos, sino que se mantuvieron como elementos independientes y se determinó la formación de zonas amorfas, en las aleaciones.

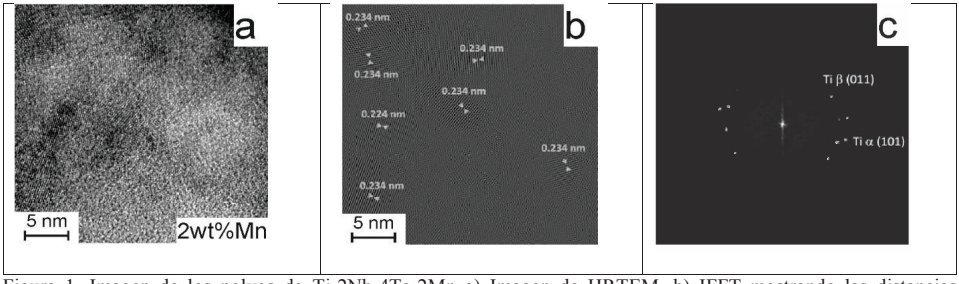


Figura 1. Imagen de los polvos de Ti-2Nb-4Ta-2Mn a) Imagen de HRTEM, b) IFFT mostrando las distancias interplanares de los cristales de 0.234 nm y 0.224 nm y c) FFT mostrando las fases de Tiα y Tiβ formadas en la aleación.

Referencias

[1] Torres **Y**, Pavon **J. J**, Nieto **I**, Rodrigiez **J. A.** (2011) *Conventional Powder Metallurgy Process and Characterization of Porous Titanium for Biomedical Applications*. Metallurgical and Materials Transactions B (**42**), 891-899

[2] Nadakuduru **V. N**, Zhang **D. L**, Cao **P**, Chiu **Y. L**, Gabbitas **B**. (2011) *The mechanical behaviour of an ultrafine grained Ti–47Al–2Cr (at%) alloy in tension and compression and at different temperatures*. Materials Science and Engineering A (**528**), 4592–4599.

Montmorillonita con cu^{+} y con au_n como catalizadores en la oxidación de monóxido de carbono

Claudia Briones Jurado,[1] Pablo de la Mora y Palomar,[2] Esther Agacino Valdés[3]
[1]Escuela Nacional de Estudios Superiores Unidad Morelia, UNAM
[2]Facultad de Ciencias, UNAM
[3]Facultad de Estudios Superiores Cuautitlán, UNAM

Los combustibles fósiles constituyen la principal fuente de energía en las actividades del ser humano, sin embargo se lleva a cabo de manera incompleta y se produce una mezcla de gases que contiene CO, que es un gas tóxico y puede estar presente en espacios abiertos y cerrados. Los convertidores catalíticos implementados en los autos a finales del siglo pasado han ayudado a abatir los niveles de los gases contaminantes. En su gran mayoría estos dispositivos están basados en platino, rodio y paladio soportados en alúmina, pero estos sistemas se pueden mejorar desde el punto de vista económico y de funcionamiento. En este sentido, desde que se reportó que las nanopartículas de oro soportadas pueden catalizar la oxidación de CO a temperatura ambiente, se ha trabajado para aplicar este descubrimiento en convertidores catalíticos y máscaras de gases con cierto éxito. Las nanopartículas de oro se han soportado en varios óxidos y también en zeolitas y minerales arcillosos, siendo éstos últimos, materiales más amigables con el medio ambiente.

En este trabajo ser presentan los resultados del estudio teórico con la teoría de los funcionales de la densidad, de la interacción de de Cu^{+} y cúmulos de oro Au_n (n=1-5) con montmorillonita, un mineral arcilloso que tiene diversas aplicaciones por sus propiedades fisicoquímicas. Además se estudia la oxidación de CO sobre estos sistemas catalíticos. La nucleación del oro sobre la montmorillonita se llevó a cabo utilizando el método de ondas planas aumentadas y linealizadas con potencial completo (FP-LAPW) como se encuentra implementado en el paquete WIEN2k. Con esto se pudo obtener la estructura de los sistemas Au_n-MMT, así como las energías de interacción y su estructura de bandas. La oxidación de CO en los sistemas catalíticos Cu-MMT y Au-MMT se estudió con el método molecular, es decir, con un cúmulo del sistema y usando también la teoría de los funcionales de la densidad implementado en el paquete ADF; con los cual se obtuvo los orbitales frontera de los sistemas catalíticos y un perfil de energía potencial de las reacciones de oxidación.

Optical Characterization of Zn-doped $Ga_{0.86}In_{0.14}As_{0.13}Sb_{0.87}$ Epitaxial Layers

M.L. Gomez-Herrera, [a] A.A. Duran-Lezama, [b] J.A. Cardona-Bedoya, [c] J. Diaz-Reyes, [d] P. Rodríguez-Fragoso, [b] J. L. Herrera-Pérez, [e] and J.G. Mendoza-Alvarez [b]

[a] *Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Querétaro,*
Cerro de las Campanas s/n, Colonia Las Campanas, Querétaro, Querétaro, CP 76010, México.
[b] *Departamento de Física, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN*
Apartado Postal 14-740, México DF 07000, México.
[c] *Facultad de Ciencias, Universidad del Tolima*
Barrio Santa Helena Parte Alta, A.A. 546, Ibagué, Tolima, Colombia.
[d] *CIBA-IPN*
Ex Hacienda de San Juan Molino, Km. 1.5, Tepetitla, Tlaxcala 90700, México.
[e] *UPIITA-IPN*
Av. Instituto Politécnico Nacional 2580, Barrio La Laguna, Ticomán, México DF 07340, México.
E-mail: lgomez401@gmail.com

Using the liquid phase epitaxy technique under supercooling conditions we have grown $Ga_{0.86}In_{0.14}As_{0.13}Sb_{0.87}$ epitaxial layers doped with zinc lattice-matched to high quality (100) *n*-GaSb substrates. Layers doped with Zn were accomplished by incorporating Zn pellets into the (GaAs+In+Sb) growth melt in the range from 0 to 6.773×10^{-4} *M*. Using Raman spectroscopy we characterized the structural quality and the compositional homogeneity; as the zinc molar fraction is increased, the Raman spectra show that the layers become more defective. The chemical stoichiometry was obtained by Energy-dispersive X-ray spectroscopy (EDX), which besides allows us to know the presence of any unintentional impurities. Raman and low temperature photoluminescence (LT-PL) spectroscopies were used to study the influence of the Zn acceptor levels on the optical properties of the quaternary epilayers. For the lowest-doped sample, the PL spectrum showed a narrow exciton-related emission peak centred at around 648 meV, which is evidence of the good crystalline quality of the layers. For higher Zn-doping, the LT-PL spectra showed the presence of band-to-band and donor-to-acceptor transitions which overlap as the Zn concentration increases. The peak of maximum energy (E_M) of the LT-PL band shifts to lower energies as Zn doping increases due to a band-filling effect as the Fermi level enters into the valence band, which might be used to estimate the carrier concentration in the samples.

We acknowledge the financial support from Conacyt-México and ICyTDF.

InGaAsSb Photodetector Grown by Liquid Phase Epitaxy: Electrical Characterization and Optical Response

D.M. Hurtado-Castañeda, [a] J.L. Herrera-Pérez, [b] J.S. Arias-Cerón, [c] C. Reyes-Betanzo, [a] P- Rodríguez-Fragoso, [d] J.G. Mendoza-Álvarez [d]

[a] *Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica*
Luis Enrique Erro # 1, Santa María Tonanzintla, Puebla 72840, México.
[b] *Unidad Profesional Interdisciplinaria de Ingeniería y Tecnología Avanzada del IPN*
Av. IPN 2580, Col. La Laguna Ticomán, México DF 07340, México.
[c] *Departamento de Ingeniería Eléctrica, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN*
Apartado Postal 14-740, México DF 07000, México.
[d] *Departamento de Física, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN*
Apartado Postal 14-740, México DF 07000, México-
E-mail: juliogma1@gmail.com

We present results on the current-voltage and R_0A curves, and the spectral response as a function of the applied bias voltage and device temperature of a p-n indium-gallium-arsenide-antimony ($In_{0.14}Ga_{0.86}As_{0.13}Sb_{0.87}$)/n-GaSb photodiode structure. InGaAsSb quaternary alloys with a bandgap energy of about 653 meV were grown using the liquid phase epitaxy (LPE) growth technique on top of high quality (100) n-GaSb substrates. The device structure was fabricated using a process that includes passivation with sodium sulfide, thermal annealing and metallizations. The diode architecture was a back-illuminated (B-I) structure with a ring-shaped metallic contact in the GaSb substrate face. Photodiode spectral response showed good performance in the entire temperature range between 20 and 300 K; which is determined by the absorption edge of the InGaAsSb layer at long wavelengths, and a cutoff at short wavelengths due to the increasing absorption of the GaSb substrate.

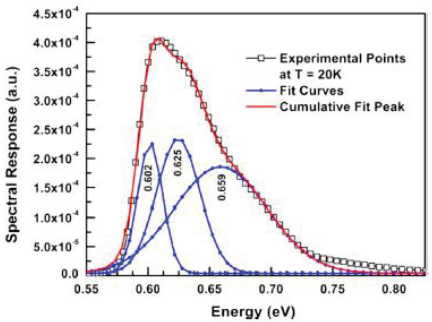


Fig. 8. Spectral response for the p–n InGaAsSb photodiode measured at 20 K.

We acknowledge the financial support of Conacyt-Mexico and the ICyTDF.

Sesión Mural

Optical absorption in δ-MIGFET transistor under modulated by electro-magnetic field and contact voltage

O. Oubram[a], I. Cisneros-Villalobos[a], M. Limón-Mendoza[a], F. Aquino Roblero[a], J. G. Velasquez Aguilar[a], Lorena Díaz González[b]

[a]*Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos*
Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209, Cuernavaca, Morelos, México.
[b] *Facultad de Ciencias Universidad Autónoma del Estado de Morelos*
Av. Universidad, 1001, Col. Chamilpa Cuernavaca, Morelos 62210, México.
E-mail: oubram@uaem.mx

Intersubband optical absorption in a GaAs n-type d-MIGFET transistor is preformed taking into account the effects of applied electro-magnetic field and contact voltage. Our results show that the position and the magnitude of the total absorption coefficient are sensitive to electro-magnetic field effects and voltage contact.

Simulación en ATP de las Sobretensiones en un CEV debido a la Falla de Interruptor

L. Cisneros-Villalobos, O. Oubram, F. Aquino-Roblero, L. Díaz-González, J. G. Velásquez-Aguilar

Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos
Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, Cuernavaca Morelos
Edificio 2, C.P. 62209
E-mail: luis.cisneros@uaem.mx

En este trabajo se lleva cabo la simulación de las sobretensiones ocurridas durante una maniobra de desconexión en un compensador estático de potencia reactiva de 230 kV. La incorrecta apertura de uno de los polos del interruptor de potencia del compensador provoca sobretensiones interesantes las cuales están relacionadas con las componentes armónicas de tensión y corriente generadas por un elemento clave de la falla: el reactor controlado por tiristores. En este trabajo se utiliza el Software Alternative Transients Program (ATP) para modelar el compensador y obtener el cálculo de las sobretensiones transitorias. Se analizan las frecuencias naturales y el espectro armónico de las señales manejadas por el sistema. Este estudio se realiza por primera vez en el compensador estático y la información resultante es de mucha utilidad futura para el diseño eléctrico y la planificación de la operación de las redes de potencia.

Materiales piezoeléctricos libres de plomo derivados de la solución sólida $K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3$

Yolanda Medrano Díaz[a], Jaime Espino Valencia[a], Rigoberto López Juárez[b]

[a]*Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*, Edif. V1, Ciudad Universitaria, C.P. 58060, Morelia, Michoacán, México.
[b]*Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México*, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. Ex Hacienda de San José de la Huerta, C.P. 58190, Morelia, Michoacán, México.
Email: rlopez@iim.unam.mx

En el presente trabajo se han sintetizado y caracterizado algunas soluciones solidas derivadas del material base $K_{0.5}Na_{0.5}NbO_3$ con adiciones de litio, antimonio, barrio, circonio y calcio. El método de síntesis usado para su preparación es el método de estado sólido. Las temperaturas utilizadas para calcinar y obtener la fase pura de los materiales fue de 850°C por 4 horas, mientras la sinterización o consolidación de las muestras se ha hecho a temperaturas entre 1100-1140°C por 4 horas. La densidad medida en las muestras sinterizadas ha superado el 90% respecto de la densidad teórica.

Mediante difracción de rayos X se demostró que las diversas composiciones preparadas tienen una estructura tipo perovskita. De los datos de constante dieléctrica vs temperatura, se observó que la temperatura de Curie disminuyó a medida que se incremento la proporción de circonio y/o calcio. Las propiedades ferroelectrica y piezoelectricas obtenidas son superiores a la mayoria de las reportadas hasta ahora para composiciones similares [1-3]. El mejoramiento de las propiedades en estos materiales, se debe principalmente a la coexistencia de fases rombohedral-tetragonal a temperatura ambiente, como se observó en los resultados de rayos x y constante dielectrica vs temperatura. La coexistencia fases permite que la polarización pueda orientarse en más direcciones que si se tuviera una solo fase, mejorando así las propiedades.

Las propiedades ferroelectricas y piezoelectricas de las composicones analizadas muestran que pueden ser usadas como sustitutos de materiales base PZT en diversas aplicaciones.

Referencias

[1] Feng, S., Xiao, D., Wu, J., Xiao, M, J. Zhu, J. (2015). *Lead-free (K,Na)NbO_3–$Bi_{0.5}K_{0.5}ZrO_3$–$BaZrO_3$ ternary system: Microstructure and electrical properties*. Journal of Alloys and Compounds (**619**), 560–563.

[2] Li, F., Xiaon, D., Wu, J., Wang, Z., Liu, C., Zhu, J. (2014). *Phase structure and electrical properties of ($K_{0.5}Na_{0.5}$)NbO_3–($Bi_{0.5}Na_{0.5}$) ZrO_3 lead-free ceramics with a sintering aid of ZnO*. Ceramics International (**40**), 14601–14605.

[3] Zhao, P., Zhang. B.P., Tu, R., Goto, T. (2008). *High Piezoelectric d_{33} Coefficient in Li/Ta/Sb-Codoped Lead-Free (Na,K)NbO_3 Ceramics Sintered at Optimal Temperature*. Journal of the American Ceramic Society (**91**), 3078–3081.

Crecimiento de películas delgadas de $ReFeAsO_{1-x}F_x$ (Re= Nd, Sm) para el estudio de superconductividad en sistemas basados en Hierro-Arsénico

I. Corrales-Mendoza, [a] A. Conde-Gallardo [a]
[a] *Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del Instituto Politécnico Nacional, Av. IPN 2508, Col. San Pedro Zacatenco. México 07360, D.F. México*
,E-mail: rcorrales@fis.cinvestav.mx

Se presenta el crecimiento y caracterización de películas delgadas policristalinas de $NdFeAsO_{1-x}F_x$, $SmFeAsO_{1-x}F_x$ sintetizadas por un método de dos pasos: obtención de películas precursoras que contienen óxidos de Fe-Nd, ó Fe-Sm mediante el depósito por vapores químicos metal-orgánicos (MO-CVD) seguido de un proceso de difusión de As-F. Los resultados de la composición, evaluados por microanálisis de dispersión de energía de rayos-X (EDS), aunado a el perfil de distribución de los elementos que integran la películas a lo largo de su espesor, analizado mediante experimentos de espectrometría de masas de iones secundarios (SIMS), así como los resultados de la evolución cristalográfica, obtenida por difracción de rayos-X, indican que el método es viable para la nucleación homogénea de los compuestos $NdFeAsO_{1-x}F_x$, y $SmFeAsO_{1-x}F_x$ con estructura cristalina P4/nmm. Las mediciones de resistencia contra temperatura (RT) indican la existencia de superconductividad en las películas de $SmFeAsO_{1-x}F_x$; mientras que para las muestras de $NdFeAsO_{1-x}F_x$ no fue posible observar superconductividad. Los distintos comportamientos son explicados y discutidos en función cantidad de dopante (F) incorporado en la fase ReFeAsO y de los factores que favorecen o no la incorporación del mismo. Se concluye que la cantidad de oxígeno durante los procesos de difusión es fundamental para que las muestras den o no señal superconductora. Así mismo la buena calidad de las películas delgadas obtenidas por esta vía evidencia que el método de dos pasos, es una excelente alternativa para obtener películas superconductoras basadas en Hierro-Arsenico.

Propiedades electrónicas de nanoalambres de Sr-Fe-Mo-O

M. Camacho [a], I. Ornelas [a], M. I. Iturrios [b], E. Carvajal [a], M. Cruz-Irisson [a], O. Navarro [c]

[a] *Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica-Culhuacán, Instituto Politécnico Nacional*
Av. Santa Ana 1000, C.P. 04430, México, D.F., México
[b] *CECyT No. 8 Narciso Bassols, Instituto Politécnico Nacional*
Av. de las Granjas 618, C.P. 02530, México, D.F., México
[c] *Unidad Morelia, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México,*
Antigua carretera a Pátzcuaro # 8701, Col. Ex-Hacienda de San José de la Huerta, C.P. 58190,
Morelia, Michoacán, México
E-mail: ecarvajalq@ipn.mx

Las celdas de combustible de óxido sólido generan energía eléctrica a partir de una reacción química acompañada por un intercambio de electrones; es decir, en tanto que uno de los reactivos se reduce, el otro se oxida al ceder los electrones que recibe el primero. Aunque estos dispositivos tienen una eficiencia elevada e impacto ecológico muy bajo, se busca la forma de construir nuevos prototipos en los que se empleen materiales nanoestructurados. Esos sistemas confinados deben ser estables pero, simultáneamente, deben tener actividad catalítica para ser considerados como candidatos para el desarrollo de cátodos de las celdas de combustible. En este trabajo se hace un estudio teórico de las propiedades electrónicas de nanoalambres de Sr-Fe-Mo-O prístinos. El eje de los nanoalambres coincide con la dirección [001] de la perovskita doble en bulto con los mismos elementos. Se optimizó la geometría, identificando la estructura con menor energía. Para los cálculos, en el marco de la Teoría de las Funcionales de la Densidad, se recurrió a la aproximación del gradiente generalizado y a la funcional de Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) [1], como está implementado en el código DMol^3. Para los alambres optimizados se hizo el cálculo de las densidades de estados electrónicos y las estructuras de bandas; se hizo el análisis poblacional y se calcularon las energías de formación.

Agradecimientos: Este trabajo ha sido apoyado parcialmente por los proyectos multidisciplinarios 2014-1640 y 2014-1641 de la SIP-Instituto Politécnico Nacional, PAPIIT-IN100313 de la Universidad Nacional Autónoma de México. M. Camacho e I. Ornelas agradecen la beca para estudios de posgrado otorgada por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología.

Referencias

[1] Perdew, J., Burke, K., Ernzerhof, M.(1996). *Generalized Gradient Approximation Made Simple*. Physical Review Letters **77**, 3865-3868.

Análisis por Simulación Dinámica Molecular del Comportamiento Asociativo del Quitosano - Glutaraldehído

M. pineda, [a] S. Vásquez, [a] N. Flores, [b] L. García, [c] J. Farías, [a] C. Paz [a]

[a] *Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
Apartado Postal 58060, Morelia, Michoacán, México.
[b] *Facultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
Apartado Postal 58060, Morelia, Michoacán, México.
[c] *Centro de Investigación en Micro y Nanotecnología de la Universidad Veracruzana*
Calzada Ruiz Cortínes #455, Col. Costa Verde, Apartado Postal 94292; Boca del Rio, Veracruz, México.
E-mail: salomon_vg@yahoo.com

El quitosano es un polímero constituido fundamentalmente por unidades de glucosamina (2-amino-2-desoxi-D-glucosa) con uniones (1-4); el cual se puede preparar por desacetilación de la quitina. Por lo general, el quitosano presenta excelentes propiedades siendo biocompatible. Por otro lado, el glutaldehído es un agente que retícula al quitosano y que es ampliamente utilizado en las áreas agrícolas y farmacéuticas [1-2]. Con el propósito de extender estas aplicaciones, en la actualidad existe una tendencia marcada por llevar a cabo simulaciones por modelación molecular mediante el uso de software's; esto para predecir la compatibilidad en mezclas de polímeros, que de otro modo sería difícil de predecir por medios experimentales [3]. Con el objetivo de entender las interacciones entre moléculas de quitosano y quitosano-glutaraldehido. Fueron aplicados dos medios de simulación: mecánica molecular (MM) y dinámica molecular (MD), ambos complementarios. Bajo mínima energía por simulación MD, se confirmó que las interacciones entre cadenas de quitosano se dan principales a través de asociaciones de hidrógeno de manera intermolecular –O-H····O-C-, lo cual se ha reportado en otros trabajos [3]. Así mismo, se obtuvo que las interacciones presentes entre el quitosano y el glutaraldehído se generaron entre el grupo H_2N- del quitosano y el O=C- del glutaraldehido, lo que coincidió con reportes previos [4]. Esto generó modificaciones en la conformación quitosano-glutaraldehído, que variaron en función de la temperatura y concentración relativa.

Referencias

[1] Hernández-Lauzardo, A.N., Bautista-Baños, S., Velázquez del Valle, M.G., Rodríguez-Ambriz, S.L., Corona-Rangel, M.L., Solano-Navarro, A. (2005). *Potencial del Quitosano en el Control de las Enfermedades Postcosecha*. Revista Mexicana de Fitopatología (**23**), 198-205.

[2] Jawalkar S.S., Raju K.V.S.N, Halligudi, S.B., Sairam M., Aminabhavi, T.M. (2007). *Molecular modeling simulations to predict compatibility of poly(vinyl alcohol) and chitosan blends: a comparison with experiments*, The Journal of Physical Chemistry (**111**), 2431-2439.

[3] Okuyama, K., Noguchi, K., Miyazawa, T. (1997), *Molecular and Crystal Structure of Hydrated Chitosan*, Macromolecules (**30**), 5849-5855.

[4] Mirzaei, E., Ramazani, A., Shafiee, M., Danaei, M. (2015). *Studies on glutaraldehyde crosslinked chitosan hydrogel properties for drug delivery system.* International Journal of Polymeric Materials and Polymeric Biomaterials (**62**), 605–611.

Energía y distribución de carga asociada a iones en nanoporos del sistema Sr_2FeMoO_6

H. Rueda [a], J. L. Rosas [a], J. Pilo [a], E. Carvajal [a], M. Cruz-Irisson [a], O. Navarro [b]

[a] *Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica-Culhuacán, Instituto Politécnico Nacional*
Av. Santa Ana 1000, C. P. 4430, México D.F., México.
[b] *Unidad Morelia, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México,*
Antigua carretera a Pátzcuaro # 8701, Col. Ex-Hacienda de San José de la Huerta, C.P. 58190,
Morelia, Michoacán, México
E-mail: ecarvajalq@ipn.mx

Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC) son una alternativa para producir energía eléctrica limpia, además de que tiene un impacto ambiental reducido la eficiencia es elevada. Por otro lado, el compuesto policristalino Sr_2FeMoO_6 (SFMO) es utilizado en los electrodos de los dispositivos, de este tipo, que hay en el mercado. En ese contexto, resulta fundamental el proceso de difusión de iones en los electrodos y, particularmente, en el SFMO. En este trabajo se estudia el proceso de difusión en el SFMO cristalino y en los nanoporos en dicho compuesto. Se modela utilizando una supercelda, construida al unir dos celdas convencionales a lo largo de la dirección [001]. Los poros se generan al remover átomos en la misma dirección [001] y se calcula la energía asociada a la ubicación de las especies (que difundirán) en diferentes sitios del compuesto y de los nanoporos. Los cálculos se realizaron en el marco de la teoría de las funcionales de la densidad, con la aproximación del gradiente generalizado (GGA) y el funcional propuesto por Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE), como está implementado en el código DMol^3. Se optimizó la geometría de las estructuras y se calcularon la densidad de estados electrónicos, la estructura de bandas y la densidad electrónica de carga, para proponer una ruta de difusión de las especies en los sistemas estudiados.

Agradecimientos: Este trabajo ha sido apoyado parcialmente por los proyectos multidisciplinarios 2014-1640 y 2014-1641 de la SIP-Instituto Politécnico Nacional, PAPIIT-IN100313 de la Universidad Nacional Autónoma de México. H. Rueda, J. L. Rosas y J. Pilo agradecen la beca para estudios de posgrado otorgada por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología.

Capa delgada de Sr-Fe-Mo-O: propiedades físicas

J. Pilo, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson

Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica-Culhuacán, Instituto Politécnico Nacional
Av. Santa Ana 1000, México, D. F., C. P. 04430, México
E-mail: ecarvajalq@ipn.mx

Los materiales medio-metálicos han llamado la atención durante los últimos años, pues esa característica los convierte en candidatos potenciales para el desarrollo de dispositivos espintrónicos. En particular, la perovskita doble Sr_2FeMoO_6 (SFMO) ha sido el objeto de estudio en numerosas investigaciones; además de ser medio-metálica, tiene una temperatura de Curie elevada (T_c~415 K) [1] y comportamiento magnetorresistivo colosal. Por otro lado, el estudio de los materiales confinados, en distinta dimensiones y direcciones, permite evidenciar y prever aplicaciones de este tipo de comportamientos [2]. El caso del confinamiento en dos dimensiones (películas delgadas), de sistemas asociados al compuesto SFMO, es lo que se presenta en este trabajo. En el marco de la Teoría de las Funcionales de la Densidad, se emplea el funcional propuesto por Ceperley-Alder y Perdew-Zunger (CA-PZ) [3,4] con la Aproximación de la Densidad Local y usando el parámetro de Hubbard (LDA+U), para calcular las propiedades físicas de una capa delgada de Sr-Fe-Mo-O: densidad de estados electrónicos, estructura de bandas y densidad electrónica de carga; además de la distribución de los momentos magnéticos. La capa delgada se generó a partir de la perovskita doble SFMO, dejando libre un plano (001).

Agradecimientos: Este trabajo ha sido apoyado parcialmente por los proyectos multidisciplinarios 2014-1640 y 2014-1641 de la SIP-Instituto Politécnico Nacional. J. Pilo agradece la beca para estudios de posgrado otorgada por el Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología.

Referencias

[1] Sarma, D. D., (2001). *A new class of magnetic materials: Sr_2FeMoO_6 and related compounds*, Curr. Opin. Solid St. M (**5**)**,** 261–268.

[2] Besse M., Pailloux, F., Barthélémy, A., *et al*., (2001). *Characterization methods of epitaxial Sr_2FeMoO_6 thin films,* J. Crys. Growth (**5**), 448–454.

[3] Ceperley, D. M., Alder, B. J., (1980) *Ground State of the Electron Gas by a Stochastic Method*, Phys. Rev. Lett. (**45**), 566–569.

[4] Perdew, J. P., Zunger, A., (1982) *Self-interaction correction to density-functional approximations for many-electron systems*, Phys. Rev. B (**23**) 5048–5079.

Nanowhiskas de Quitina: Obtención y Caracterización Morfológica - Estructural

V. Campos, [a] N. Flores, [b] S.R. Vásquez, [c] L. Domratcheva [b]

[a] *Maestría Interinstitucional en Ciencias Biológicas, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
58030, Morelia, Michoacán, México.
[b] *Facultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
58060, Morelia, Michoacán, México.
[c] *Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
58060, Morelia, Michoacán, México.
E-mail: frnelly@umich.mx

En este estudio se llevó acabo la obtención de nanowhiskas de quitina (NWQ), el cual es un polímero natural que presenta excelentes propiedades mecánicas través de la formación de fibras o películas [1]. En base a lo anterior, se considera que los nanowhiskas mejoraran la disponibilidad de suministro y protección a la astaxantina, que es considerada un antioxidante con actividad 10 veces mayor que otros carotenoides tales como zeaxantina, luteína y β-caroteno; y 100 veces más que α-tocoferol [2]. Debido a su actividad antioxidante ha presentado un gran interés como nutracéutico [3-5]. Sin embargo, esta molécula es altamente insaturada y se descompone fácilmente por calor, luz UV y oxígeno. Así, los NWQ fueron obtenidos por dos procesos: criotratamiento/agitación mecánica y por criotratamiento/zonificación. Posteriormente los NWQ fueron caracterizados por microscopia electrónica de barrido (MEB), FTIR y tamaño de partícula. La caracterización morfología mostró que las NWQ obtenidos por criotratamiento/zonificación presentan longitudes transversales de 50 nm y las fibras se encuentran separadas y orientadas uniformemente con crecimientos hacia el exterior de la superficie de la muestra. Para los dos procesos de obtención de NWQ se obtuvo una alta área superficial la cual puede ser útil para la funcionalización de la misma y la incorporación de la astaxantina. Por FTIR se confirma que en los NWQ prevalece la estructura esencial de la quitina y para el caso de los NWQ/ zonificación se observó una alta definición de las señales correspondiente a un arreglo estructural ordenado de la quitina.

Referencias

[1] Pastor, A. A. E Higuera, (2004). *Generalidades en quitina y quitosano: obtención, características y aplicaciones*. 1ª ed. Ed. Fondo Editorial Pontificia Universidad Católica de Perú.Pp. 312
[2] Miki, W. (1991). *Biological functions and activities of animal carotenoids.* Pure &Appl. Chem (**63**), 141-146.
[3] McCoy M. (1999). *Astaxanthin market a hard one to crack.*. Pure &Appl. Chemical Engineering News., 15-17.
[4] Ziegler, R.G. (1991). *Vegetables, fruits and carotenoids and the risk of cancers*. Am. J. Clin. Nur., (**53**), 251s-259s
[5] Mayne, S.T. (1996). *Beta-carotene, carotenoids, and disease prevention in humans*. *The Faseb Journal*., (**10)**, 690–701.

Obtención de nanotubos de carbono por pirolisis de éter dietílico

A. Duran Navarro, [a] F. G. Granados Martínez, [a] L. Domratcheva Lvova, [a] J.J. Contreras Navarrete, [a] M. R. Cisneros Magaña, [a] L. García González, [b] Ma. De L. Mondragón Sánchez [c]

[a] *Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
Gral. Francisco J. Múgica S/N, Felicitas del Río, 58030 Morelia, Mich., México.
[b] *Centro de Investigaciones en Micro y Nanotecnología de la Universidad Veracruzana*
Boca del Río, Veracruz, México
[c] *Instituto Tecnológico de Morelia*
Av. Tecnológico 1500, Lomas de Santiaguito, 58020 Morelia, Mich., México.
E-mail: duran.alex.25@gmail.com

Después de casi 40 años de su descubrimiento por Endo en 1976 y 25 años de las primeras caracterizaciones por Ijima en 1991 [1], ha sido posible descubrir las excepcionales propiedades mecánicas y electromagnéticas de los nanotubos de carbono proporcionando un sinfín de aplicaciones prácticas.

Existe un gran número de métodos para la síntesis de nanotubos de carbono (CNTs), entre los cuales se encuentran: arco eléctrico, ablación laser y deposición química de vapor (CVD), la elección de este último se debe a que presenta una mayor eficiencia y control de la propiedades durante la síntesis de CNTs [2]. Los métodos más comunes para la obtención de CNTs por el método de CVD emplean componentes altamente dañinos para la salud o contaminantes con el medio ambiento, por lo cual se busca la síntesis de CNTs por medio de nuevos precursores que tengan un menor impacto en la salud y el medio ambiente.

La síntesis se llevó a cabo mediante la técnica CVD, usando 100 ml de éter dietilico como precursor. Se empleó un tubo de cuarzo como reactor con un núcleo de acero inoxidable AISI 304 fungiendo como catalizador. La síntesis se realizó dentro de un horno a una temperatura de 680°C, manteniendo un flujo de argón con el fin de transportar el precursor a la zona de reacción y evitar la combustión. El proceso se llevó acabo en rangos de 30-60 min.

Las muestras obtenidas durante este proceso se analizaron por medio de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM), Espectroscopía de Energía Dispersa (EDS) y Espectroscopia Infrarroja de Transformada de Fourier (FTIR). A través de las micrografías SEM obtenidas se puede apreciar una formación desordenada de CNTs, debido a esto la medición de su largo resulta imposible. Los diámetros obtenidos oscilan entre los 80-200 nm. Las pruebas por EDS muestran una composición atómica de 93% de carbono, 5% de oxígeno, 1.4% de hierro y menos del 1% de manganeso y cromo.

Agradecemos especialmente por el apoyo recibido para esta investigación a los proyectos CIC de la UMSNH y de Redes de Colaboración “Materiales Nanoestructurados” de PRODEP (SEP).

Referencias

[1] Endo, M. (2006). Development and Application of Carbon Nanotubes, Japanese Journal of Applied Physics 45(**6A**), 4883-4892.
[2] Kumar, M., Ando, Y. (2010). Chemical vapor deposition of carbon nanotubes: a review on growth mechanism and mass production. Journal of nanoscience and nanotechnology, 10(**6**), 3739-3758.

Análisis Cuantitativo de una Sustancial Bifuncionalización del Ácido Abiético

E. Guzmán,[a] N. Flores,[a] S. R. Vásquez,[b] L. García[c]

[a]*Facultad de Ingeniería en Tecnología de la Madera, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo,* 58030, Morelia, Michoacán, México.
[b]*Facultad de Ingeniería Química, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo,* 58030, Morelia, Michoacán, México
[c] Centro de Investigación en Micro y Nanotecnología de la Universidad Veracruzana, 94292, Boca del Rio, Veracruz, México.
E-mail: frnelly@umich.mx

Una de las materias primas naturales de amplia aplicación en la elaboración de barnices, es la resina de colofonia la cual está compuesta en la mayoría de los casos por 85 % de ácidos resínicos, siendo el ácido abiético el principal componente. Por otra parte, los tratamientos superficiales protectores (barnices) basados en poliuretano buscan igualar las tensiones superficiales entre el material base y el barniz utilizado [1-3]. La aportación de este trabajo consiste en la formulación y fabricación de un recubrimiento orgánico a base de brea, partiendo de un monómero bifuncional del ácido abiético, formando un diol, que al adicionarle un poliuretano aumentará las propiedades físico-químicas, mecánicas, y la actividad antimicrobiana, entre otras [4,5]. Los grupos polares (OH's) de un polímero presentan una orientación a lo largo del eje molecular incrementando el contacto intermolecular, por lo que se favorece su interacción con los grupos isocianatos. La reacción de hidroxilación del ácido abiético de la brea ocurre en el sistema de los dobles enlaces y la generación de grupos hidroxilos activos, mediante la reacción con permanganato de potasio. Así, se obtuvieron muestras, mediante un análisis estructural por FTIR indicó la presencia de grupos OH's libres. Por cromatografía de gases se determinaron sus compuestos, y por el método de anillo y bola se obtuvo su punto de ablandamiento. Adicionalmente se determinó su índice de acidez y color Gardner. El análisis estructural evidenció la presencia de grupos correspondientes tanto a los grupos COOH, como de los OH's producto de la funcionalización. La reacción de hidroxilación promovió una isomerización en el ácido abiético, generando más sitios activos con grupos OH´s, la hidroxilación generó un 6.18% de grupos hidroxilos, por lo que el 7.34 % son sitios activos. Además se determinaron valores de conversión del 90%, buenos parámetros de color, índice de acidez y principalmente un aumento de 14 unidades de punto de ablandamiento, lo que generó una mayor dureza al ser aplicado sobre una superficie.

Referencias

[1] R. E Kirk, D. F. Othmer, (1963). *Enciclopedia de Tecnología Química: Polipropileno y Poli butileno-Revestimientos de telas,* 914.
[2] H. F. Payne, (1984). *Organic Coating Technology, Oils, Resins, Varnishes, and Polymer* (**1**).
[3] Grandou, P. Pastour, (1998). *Peinture et vernis. Techniques et industrie. Types de revêtements, matériaux à peindre, utilisation, utilisateurs, spécialites, production, controle, viellissement et destruction des revêtement*.
[4] S. kantheti, P.S. Sarath, R. Narayan, K.V.S.N. Raju.,Knatheti. (2013). *Synthesis and characterization of triazole rich polyether polyols using click chemistry for highly branched polyurethanes. Reactive and Functional Polymers,*73*,* (**12**).
[5] S. D. Rajput, P. P. Mahulikar, V. V. Gite, (2014). *Biobased dimer fatty acid containing two pack polyurethane for wood finished coatings*, Progress in Organic Coatings (**77**), 38-46.

Obtención de nanotubos de carbono a partir de pirólisis del etil acetato

D. L. García Ruiz, [a] F. G. Granados Martínez, [a] L. Domratcheva Lvova, [a] M. R. Cisneros Magaña, [a] L. García González, [b] Ma. De L. Mondragón Sánchez [c]

[a] *Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo*
Gral. Francisco J. Múgica S/N, Felicitas del Río, 58030 Morelia, Mich., México.
[b] *Centro de Investigaciones en Micro y Nanotecnología de la Universidad Veracruzana*
Boca del Río, Veracruz, México
[c] *Instituto Tecnológico de Morelia*
Av. Tecnológico 1500, Lomas de Santiaguito, 58020 Morelia, Mich., México.
E-mail: united_moon_sun@hotmail.com

El desarrollo de nanotubos de carbono (CNTs), ha tenido una gran repercusión en los últimos años, bajo diversas técnicas y precursores. Actualmente el interés se ha centrado en el uso de precursores orgánicos más ecológicos que permitan disminuir riesgos en la salud y en el medio ambiente [1]. En el presente trabajo se investigó la pirólisis de etil acetato sobre catalizador de acero inoxidable para obtener CNTs.

Se utilizó un tubo de cuarzo con diámetro de 0.0254 m y 0.6 m de largo como reactor. Como catalizador se colocó un tubo de acero inoxidable AISI 304 de 0.019 m de diámetro, en el interior del tubo de cuarzo. La temperatura varió de 800 a 815°C dentro de un horno tubular horizontal, para llevar a cabo el proceso de pirólisis de etil acetato. Se usó argón como gas transportador con un flujo alrededor de 70 ml/min. El tiempo de proceso fue de 40 min.

Las muestras obtenidas fueron analizadas a través de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM), Espectroscopía de Energía Dispersa (EDS) y Espectroscopía Infrarroja por la Transformada de Fourier (FTIR). Los diámetros de los CNTs varían de 100 a 300 nm. El análisis EDS de los elementos presentes, mostró porcentajes atómicos de carbono 93.51%, de oxigeno 4.99% y de hierro 1.50%.

Se agradece el apoyo recibido para esta investigación a los proyectos CIC de la UMSNH y de Redes de Colaboración “Materiales Nanoestructurados” de PRODEP (SEP).

Referencias

[1] W. Li, J. Peng, L. Zhang, K. Yang, H. Xia, S.Zhang, S. Guo, Preparation of activated carbon from coconut shell chars in pilot-scale microwave heating equipment at 60 KW, Waste Manage. 29 (2009)

Estudio teórico de las propiedades mecánicas en Silicio y Germanio cristalino

S. Benítez,[a] F. Salazar,[a] L. A. Pérez,[b] M. Cruz-Irisson[a]

[a] *ESIME-Culhuacán, Instituto Politécnico Nacional*
Avenida Santa Ana 1000, San Francisco Culhuacán, Coyoacán, 04430 México D.F., México.
[b] *Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México*
A.P. 20-364, 01000, México, D.F., México.
E-mail: fsalazarp@ipn.mx

En este trabajo presentamos un estudio teórico del coeficiente de expansión volumétrica y el módulo de Young en Silicio (Si) y Germanio (Ge) cristalinos. El estudio se realiza usando el método de superceldas y la teoría del funcional de la densidad con pseudopotenciales que conservan la norma y dentro de la aproximación de densidad local implementados en el código SIESTA [1]. La ecuación de estado isotérmica más simple para un sólido es el módulo de expansión volumétrica (K). En este estudio se analizan tres relaciones para determinar K, una relación lineal presión-volumen, una relación cuadrática energía-volumen y la ecuación de estado de Murnaghan. Para las dos primeras se hace un ajuste lineal y cuadrático, respectivamente mientras que para ajustar a la ecuación de Murnaghan se requiere un ajuste no lineal. Los resultados muestran que el valor más cercano al experimental se obtiene con la ecuación de Murnaghan. Por otro lado, se calcula el módulo de Young en las direcciones cristalográficas [001] y [111] para ambos sistemas cristalinos. Los resultados muestran una variación menor al 10 % respecto al valor experimental. Este estudio podría extenderse a nanoalambres semiconductores y predecir sus propiedades mecánicas.

Agradecimientos:

Este trabajo fue financiado por el proyecto multidisciplinario 2014-1640 y 2014-1641 de la Secretaría de Investigación y Posgrado del Instituto Politécnico Nacional, así como por el proyecto DGAPA-UNAM IN106714.

Referencias

[1] J. Soler, E. Artacho, J. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón and D. Sánchez-Portal, *J. Phys.: Condens Matter*, 2002, **14**, 2745-2779.

A new approach to calculate joint density of states in direct band gap materials

C. I. Cabrera, [a] D. A. Contreras-Solorio, [a] L. Hernández [b]

[a] *Academic Unit of Physics, Autonomous University of Zacatecas*
Czda. Solidaridad y Paseo La Bufa, 98060 Zacatecas, Zac., México.
[b] *Faculty of Physics. University of Havana*
Colina Universitaria. 10400 La Habana, Cuba.
E-mail: civan0709@gmail.com

A new approach to calculate joint density of states (JDOS) function in direct band gap materials is presented in this work. This function provides a measure of the number of allowed optical transitions between the occupied valence band electronic states and the unoccupied conduction band electronic states separated by photon energy, h. We define JDOS function proportional to the convolution over the valence band and conduction band density of states (DOS) functions in the presence of selections rule for transitions, depicting a new picture. The classical equation for JDOS function in 3D system is obtained with our method. The usefulness of the approach is shown in the accurate computation of JDOS in quantum wells and superlattices. From JDOS values, we evaluate the absorption coefficient and compare with experimental results reported for quantum wells and superlattices.

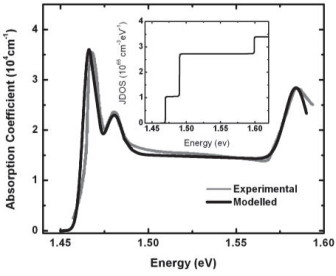


Figura 1: Modeled and experimental absorption coefficient versus energy for a AlGaAs/GaAs multiple quantum well sample [1]. The inset shows the modeled JDOS. A good agreement with the experimental data is achieved.

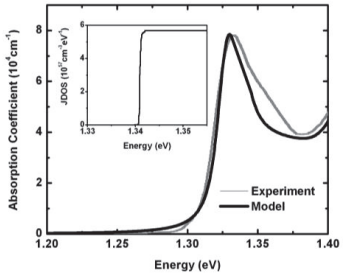


Figura 2: Modeled and experimental absorption coefficient versus energy for a InGaAs/GaAsP/GaAs superlattice solar cell sample [2]. The inset shows the modeled superlattice JDOS. A good agreement with the experimental data is achieved.

Referencias

[1] D. A. B. Miller, D. S. Chemla, D. J. Eilenberger, P. W. Smith, A. C. Gossard and W. T. Tsang. (1982). *Large room-temperature optical nonlinearity in GaAs/Ga1−x Al x As multiple quantum well structures.* Appl. Phys. Lett. (**41**), 679.
[2] Taketo Aihara, Atsuhiko Fukuyama, Yuki Yokoyama, Michiya Kojima, Hidetoshi Suzuki, Masakazu Sugiyama, Yoshiaki Nakano, Tetsuo Ikari. (2014). *Detection of miniband formation in strain-balanced InGaAs/GaAsP quantum well solar cells by using a piezoelectric photothermal spectroscopy*. J. Appl. Phys. (**116**), 044509.

Estudio de los efectos del enlace Si-X (X=F, Cl) sobre las propiedades químicas y electrónicas de nanoporos de 3C-SiC con superficie terminada en silicio.

M. Calvino [a], A. Trejo [a], M. I. Iturrios [b], M.C. Crisóstomo [b], E. Carvajal [a] y M. Cruz-Irisson [a]

[a] *Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacan,*
Av. Santa Ana 1000, C.P. 04430, México D.F., México.
[b] *Instituto Politécnico Nacional, CECyT No. 8 Narciso Bassols,*
Av. de las Granjas 618, C.P. 02530, México D.F., México.
E-mail: irisson@ipn.mx

El carburo de silicio (SiC) es un compuesto binario que ha sido identificado como un material semiconductor alternativo para aplicaciones de alta potencia, debido a su naturaleza química, su alta conductividad térmica, alta estabilidad mecánica, y una brecha de energía amplia [1]. En particular, el politipo β-SiC se puede sintetizar en una variedad de nanoestructuras, tales como nanoporos que son especialmente interesantes, ya que estos exhiben una gran área de superficie interna la cual es altamente reactiva, por lo que tienen potencial para aplicaciones como material sensor [2]. Para el desarrollo de estas aplicaciones, es esencial entender los efectos de modificar la superficie de la estructura de carburo de silicio poroso (pSiC) sobre sus propiedades electrónicas y estabilidad energética.

Motivados por recientes estudios teóricos y experimentales sobre la síntesis y caracterización de pSiC, realizamos un estudio analizando el efecto de la pasivación superficial en pSiC con átomos de Flúor (F) y Cloro (Cl), por medio de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) utilizando la aproximación de gradiente generalizado (GGA), con una base de ondas planas a través de la técnica de superceldas [3].

Las estructuras porosas se modelaron mediante la eliminación de columnas de átomos de un cristal perfecto de SiC en la dirección [001], de tal forma que la estructura porosa exhibe una superficie compuesta exclusivamente de átomos de Si. Se analizaron los cambios de los estados electrónicos del pSiC modificando la superficie al pasivar con átomos de Hidrógeno (H), F y Cl.

Los resultados muestran que las propiedades electrónicas del pSiC se ven influenciadas por la pasivación de la superficie de la estructura porosa. Los casos con pasivación de F y Cl exhibieron una evolución irregular en la brecha prohibida de energía. El análisis estructural muestra una gran dependencia de las características de los enlaces debidos a la electronegatividad de los átomos unidos, todos los cambios estructurales y electrónicos podrían explicarse utilizando TRePEV, donde el número de pares libres en la superficie cambia la reactividad de los enlaces [4]. Estos resultados podrían ser importantes en la caracterización de pSiC porque proporcionan información sobre las configuraciones de superficie más estables y sus estructuras electrónicas [5].

Agradecimientos:

Este trabajo fue soportado por los proyectos: SIP-IPN 2014-1640 y 2014-1641 del Instituto Politécnico Nacional

Referencias

[1] A. Trejo, J. L. Cuevas, F. Salazar, E. Carvajal and M. Cruz-Irisson, J. Mol. Model 19 (2013) 2043-2048.
[2] A. Trejo, M. Calvino, E. Ramos, M. Cruz-Irisson, Nanoscale Res. Lett. *7*, (2012) 471.
[3] M. Calvino, A. Trejo, E. Carvajal, G.I. Duchen and M. Cruz-Irisson, *Mater. Sci. Eng. B.* 177 (2012) 1482-1486.
[4] V. G. S. Box, Molecular modeling annual 3, 3 (1997) 124-141.
[5] M. Calvino, A. Trejo, M. Iturrios, M. C. Crisóstomo, M. Cruz-Irisson, J. Nanomat. 2014, (2014) 471351.

Conductividad térmica en sistemas unidimensionales usando la fórmula de Kubo-Greenwood

F. Mendoza, [a] F. Salazar, [a] M. Cruz-Irisson, [a]

[a] *Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica-Culhuacán, Instituto Politécnico Nacional*
Av. Santa Ana 1000, C. P. 04430, D. F., México.
E-mail: fsalazarp@ipn.mx

En este trabajo se estudia la conductividad térmica en sistemas unidimensionales dentro de la aproximación de respuesta lineal usando la fórmula de Kubo-Greenwood, la cual esta expresada como productos de funciones de Green [1] y del operador de modos longitudinales A [2]. El sistema se modela a partir de una cadena lineal finita con masas y constantes elásticas variables. Se construye la matriz dinámica considerando interacción a primeros vecinos y se obtienen los modos normales de vibración, así como los vectores propios. Con el conjunto de vectores propios se hace un cambio de base a la función de Green y al operador A con lo que se obtienen matrices diagonales. Los resultados muestran que con este método la eficiencia computacional mejora respecto al proceso de inversión de matrices.

Agradecimientos:

Este trabajo fue financiado por el proyecto multidisciplinario 2014-1640 y 2014-1641 de la Secretaría de Investigación y Posgrado del Instituto Politécnico Nacional, así como por el proyecto DGAPA-UNAM IN106714.

Referencias

[1] E.N.Economou, (2006). *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York.

[2] J. K. Flicker, P. L. Leath, Phys. Rev. B **6**, 2296 (1973).

Cálculo a primeros principios de las propiedades vibracionales de nanoalambres de InP.

M. Ojeda[1], A. Trejo[1], M. Cruz-Irisson[1,*]

Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica Unidad Culhuacan. Instituto Politécnico Nacional
Av. Santa Ana 1000, 4430 México D.F., México.
E-mail: **irisson.ipn@gmail.com**

El fosfuro de indio (InP), es un material de gran interés debido a que posee una banda prohibida directa de un valor de 1.38 eV a temperatura ambiente, esto lo convierte en un material con aplicaciones en optoelectrónica, como lo son en láseres y óptoacopladores. Las nanoestucturas semiconductoras a base de fosfuro de indio especialmente los nanoalambres de fosfuro de indio, presentan propiedades que resultan potencialmente interesantes para el desarrollo de múltiples tecnologías como por ejemplo en celdas solares donde se utilizan como un material activo para la conversión de energía. Existen muchos estudios experimentales sobre estos nanoalambres, sin embargo la cantidad de estudios teóricos es muy limitada en especial los de propiedades vibracionales los cuales pueden ayudar a explicar varios fenómenos físicos de estas estructuras.

En este trabajo, se estudiaron las propiedades vibracionales de nanoalambres de InP utilizando el método de la teoría del funcional de la densidad y el método de superceldas [1,2], donde los nanoalambres fueron modelados removiendo átomos de un cristal de InP sobre la dirección [1 1 1], en este caso la periodicidad del nanoalambre es de $\sqrt{3}a$, siendo a la constante de red del InP. Además los enlaces sueltos fueron pasivados con átomos de H.

Las estructuras de bandas y la densidad de estados de fonones de los nanoalambres, muestran que el efecto de confinamiento cuántico sobre estas nanoestructuras produce un corrimiento hacia menores frecuencias de los modos ópticos de más alta frecuencia debidos al In y al P en comparación al InP cristalino, sin embargo este efecto se ve enmascarado en cierta medida debido a la presencia de los átomos de H pasivando la superficie que producen modos de vibración de doblez alrededor de la frecuencia de los modos ópticos de más alta frecuencia del InP.

Agradecimientos: Este trabajo fue soportado por los proyectos: SIP-IPN 2014-1640 y 2014-1641 del Instituto Politécnico Nacional

Referencias

[1] A. Trejo, R. Vázquez Medina, G. I. Duchén and M. Cruz-Irisson, Physica E., Vol. 51, (2013) 10-14.
[2] Stefano Baroni, Stefano de Gironcoli and Andrea Dal Corso, Rev. Mod. Phys. Vol. 73, No. 2 (2001) 515-562.
[3] H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Phys. Rev. B, Vol. 13, No. 12, (1976) 5188-5192.

Propiedades electrónicas del silicio poroso litiado

A. Rodríguez, A. Trejo, M. Cruz Irisson

Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica Unidad Culhuacan. Instituto Politécnico Nacional
Av. Santa Ana 1000, 4430 México D.F., México.
E-mail: **irisson.ipn@gmail.com**

La rápida evolución de los dispositivos electrónicos portátiles y dispositivos para la utilización de energías renovables ha llevado al desarrollo de la investigación de nuevos materiales para ánodos de baterías de ion de Litio, buscando así un incremento de la capacidad de carga del dispositivo de almacenamiento y que dicha capacidad se conserve durante un mayor número de ciclos de carga-descarga. Uno de los materiales más interesantes de dichas investigaciones es el silicio, ya que tiene una capacidad de carga alrededor de 4200mAH/g, sin embargo este material presenta una desventaja, presenta una expansión volumétrica de casi 300% al llevarse a cabo la inserción iones de litio, por consecuencia tiende a fracturarse. Una de las alternativas para resolver este problema es el empleo de materiales nanoporosos como material anódico lo cual permitiría reducir los efectos de la fractura del material debido a su expansión volumétrica.

En este trabajo se estudiará el efecto de Li sobre la estructura y propiedades electrónicas de nanoporos de silicio, utilizando la teoría de funcionales de la densidad con la aproximación del gradiente generalizado y pseudopotenciales del tipo conservador de la norma. Los nanoporos son modelados usando la técnica de superceldas [1,2], removiendo átomos en la dirección [001], utilizando una estructura cristalina tipo diamante de Si. La inserción de Li se realizó sobre la superficie de los poros generados saturando los enlaces sueltos restantes con hidrógeno.

Los resultados muestran, que la inserción de un solo Li sobre la superficie, altera la estructura de bandas notablemente. Cuanto más Li se inserta, existe un número mayor de bandas que cruzan el nivel de la energía de Fermi, mostrando un comportamiento metálico en el material. Los resultados de los cálculos de energía de formación, nos muestra que no existe una tendencia, conforme se insertan los Li en la superficie. La estructura con energía de formación de menor magnitud es la que contiene 10 Li en la superficie, lo cual sugiere que aun a en altas concentraciones de Li las estructuras porosas son estables. Estos resultados podrían ser importantes para el uso del Silicio poroso, para aplicaciones en baterías de ion-litio, ya que se observó que las estructuras son buenos conductores, debido a su carácter metálico.

Agradecimientos.

Este trabajo fue soportado por los proyectos: SIP-IPN 2014-1640 y 2014-1641 del Instituto Politécnico Nacional.

Referencias

[1] M. Calvino, A. Trejo, M. I. Iturrios, M. C. Crisóstomo, E. Carvajal and M. Cruz-Irisson, J. of Nanomat.. Vol. 2014, (2014) 471351.
[2] A. Trejo, M. Calvino, E. Ramos, and M. Cruz-Irisson, Nanoscale Res. Lett. Vol 7, (2012) 471-500.

Síntesis de nanoalambres de ZnO mediante oxidación térmica, empleando un substrato de Zn-Al-Ag

J.M. Ambriz-Torres, M. L. Mondragón-Sánchez, G. Gutiérrez-Gnechi

Posgrado en Ciencias en Metalurgia, Instituto Tecnológico de Morelia,
Av. Tecnológico No. 1500, Col. Lomas de Santiaguito, Morelia, Michoacán, C.P. 58120 México,
E-mail: jaelmadai_89@hotmail.com

La nanotecnología desempeña un papel importante en el desarrollo de métodos innovadores para generar nuevos productos, sustituyendo el equipo de producción existente y reformulando nuevos materiales y productos químicos con un mejor rendimiento lo que resulta en un menor consumo de energía y de materiales para reducir el daño del medio ambiente [1]. En este trabajo se llevó a cabo el crecimiento de nanoalambres de ZnO (compuesto relativamente biocompatible, biosaludable y de poca toxicidad), empleando probetas fracturadas de una aleación de Zn-Al-Ag, se estudió una probeta con un contenido en plata del 1% y otra del 4%, empleadas como substratos (Figura 1) , aplicando un método sencillo, económico y amigable con el medio ambiente, ya que no se requirió de temperaturas tan elevadas como las que se emplean en otros métodos, así mismo los métodos químicos muestran resultados interesantes en la síntesis de nanoalambres, pero dejan subproductos nocivos difícil de deshacer[2]. En este caso las probetas objeto de estudio se limpiaron en un baño de ultrasonido con acetona durante 12 minutos, para remover las impurezas presentes y posteriormente se sometieron a oxidación con un tratamiento térmico a temperatura de 450°C con una hora de permanencia y enfriadas súbitamente en agua (temple). Cada sección fue caracterizada por MEB antes y después de dicho tratamiento. Los resultados fueron satisfactorios en el caso de las probetas con un mayor contenido en plata la cual actúa como catalizador, ya que se obtuvo una mayor cantidad de nanoalambres para las probetas con 4% en Ag (Figura 2 a y c) con respecto a las de 2% (figura 2 b y d), para ambos casos los nanoalambres presentaron diámetros aproximadamente entre 48.1 y 63.8 nm y con longitudes de 2 a 7 µm.

Figura 2. Probetas de la aleación Zn-Al- Ag empleadas como substratos para el crecimiento de nanoalambres.

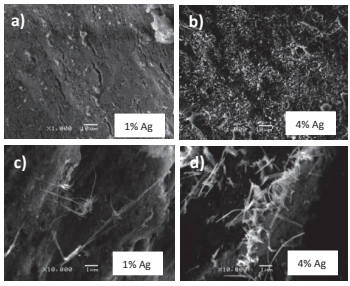


Figura 1. Nanoalambres obtenidos en el substrato Zn-Al-Ag a 1000 x y 10,000 x. (a y c) de 1% en Ag (b y d) de 4% en Ag.

Referencias

[1]. G.A.Mansoori ,T. R.Bastami, (2008). Environmental application of nanotechnology*, Nano Research (***2***), 1-14.*
[2]. Phani K. V, Prashant N, (2011). Synthesis of Crystalline ZnO Nanostructures on Arbitrary Substrates at Ambient Conditions, Nobuhiko (**8106**), 1-11.

Análisis del comportamiento mecánico de la aleación 77.5 %Zn-18.5 %Al- 4 %Ag bajo condiciones de termofluencia a temperatura de 27°C

Y. Solana-Reyes, G. Gutiérrez-Gnechi, M. L. Mondragón-Sánchez, J.J. Montoya-Cruz, F.Reyes-Calderón

Instituto Tecnológico de Morelia, Posgrado en Metalurgia
Av. Tecnológico No. 1500, Col. Lomas de Santiaguito, Morelia, Mich, C.P. 58120,
E-mail: yadis_0828@hotmail.com

Se estudió el comportamiento de la aleación 77.5 %Zn-18.5 %Al-4 %Ag bajo condiciones de termofluencia a la temperatura de 27°C y a rapideces de deformación de $\acute{\varepsilon}_1$=8.33x10^{-3}, $\acute{\varepsilon}_2$=2.0833x10^{-4} y $\acute{\varepsilon}_3$ =2.0833x10^{-5} seg^{-1}, para ello, se realizaron en primer lugar ensayos de tracción a 27 ºC y a rapideces de deformación $\acute{\varepsilon}_1$, $\acute{\varepsilon}_2$, y $\acute{\varepsilon}_3$ a fin de determinar los esfuerzos máximos ($\sigma_{Máx.}$) a tensión correspondientes a las rapideces de deformación ensayadas. Los ensayos de termofluencia se efectuaron a 27 ºC, utilizándose una carga de ensayo constante del 50 y 70% del esfuerzo máximo a tensión. Ambos ensayos se realizaron en una en una Máquina Universal de Pruebas Instron. La figura 1, muestra las curvas de termofluencia (%ε_{vs} t), en ella se puede observar que al disminuir la rapidez de deformación, aumentan los tiempos de fractura de las probetas, tanto en los ensayos realizados al 50% del esfuerzo máximo ($\sigma_{Máx.}$) como en los realizados al 70%. Al aumentar la rapidez de deformación ($\acute{\varepsilon}$) o el esfuerzo de ensayo, disminuye la etapa correspondiente al estado estacionario del ensayo de termofluencia, hasta prácticamente desaparecer a la rapidez de deformación $\acute{\varepsilon}_1$ =8.33x10^{-3} seg^{-1} con un 70% del esfuerzo de ensayo ($\sigma_{Máx.}$). Se determinó por Microanálisis mediante el MEB, una disminución del porcentaje del elemento Ag en la fractura.

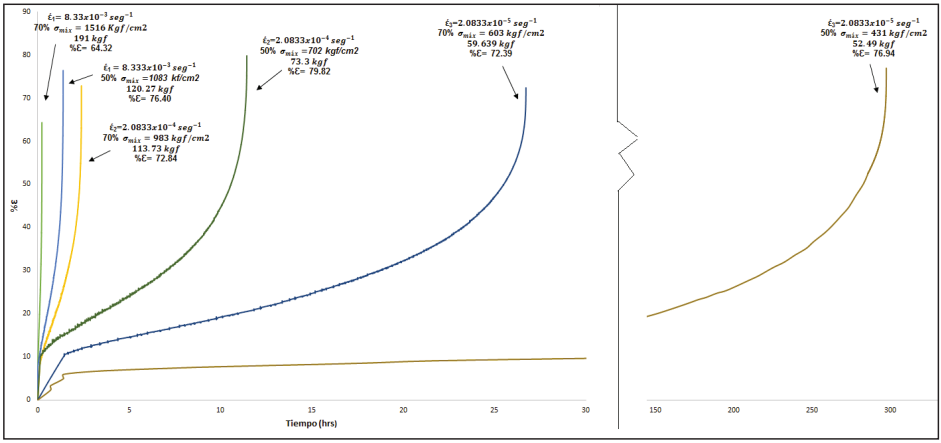


Figura 1. Curvas de termofluencia.

Referencias

[1] Turner, David Malcolm. "*Superplasticity in the Zn-1% aluminum system".* pp. 72-75. *"Nonferrous alloys and special purpuse materials".* 1990. pp. 1619,1628. Vol. 2.

[2] *"Nonferrous alloys and special purpuse materials"*. 1990. pp. 1619,1628. Vol. 2.

Panel Cerámico Emisor de Luz de Estado Sólido: Un análisis de su micro y nano-estructura

J.C. Rubio-Avalos

Secc. de Investigación e Innovación Tecnológica en Materiales para la Construcción, Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo.
Edificio "F", C.U. Morelia, Michoacán, México.
E-mail: j.c.rubio.avalos@gmail.com

La industria cerámica en México tiene una alta importancia económica debido a su alto consumo por el sector de la construcción, la mayoría de ésta se utiliza como material para recubrimientos, el consumo energético es elevado y oscila entre 900ºC y 1250ºC dependiendo de la calidad de la misma. En su mayoría son materiales cristalinos y opacos que no permiten la transmisión de luz de su exterior al interior o viceversa y debido a sus altas temperaturas de fabricación es imposible el incorporar en sus matrices cualquier dispositivo electrónico con la finalidad de hacerla "inteligente o funcional".

El presente trabajo de investigación y desarrollo tecnológico se enfoca a la invención de una nueva cerámica inteligente (Smart Digital Ceramic) la cual está constituida por una matriz formada por un gel amorfo a nano-cristalino e incluye en su composición entre un 60% y 80% de vidrio reciclado para incrementar su transmisión de luz y adicionalmente se logró su síntesis a temperatura ambiente o cercana a ella, entre 40°C-50°C lo que permite incrementar el valor de reciclado de vidrio y la incorporación y uso de dispositivos electrónicos tales como diodos emisores de luz, sensores, micro-procesadores, entre otros dependiendo de su aplicación. Para ejemplificar en este trabajo se presenta la incorporación de Diodos emisores (LED´s) obteniendo una cerámica emisora de luz para aplicaciones en paneles inteligentes, señalamientos, y diversos productos de la Arquitectura y Construcción. Para lograr lo anterior, posterior a la síntesis del gel constituido básicamente por $K_n(-SiO_2)z\text{-}AlO_2)n$, wH_2O [1,2], se realizaron estudios por microscopía electrónica de barrido así como microscopía electrónica de transmisión con la finalidad de caracterizar al sólido obtenido y determinar su morfología y su viabilidad para ser utilizado en la fabricación de este tipo de cerámicas inteligentes de baja temperatura.

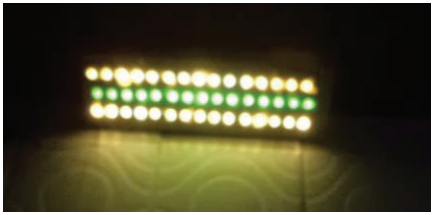


Figura 1: Panel cerámico emisor de luz en funcionamiento.

Referencias

[1] J.C. Rubio-Avalos et. al, (2014). *Patente No. 326787*, Instituto Mexicano de la Propiedad Industrial, México.
[2] Gasca-Tirado J.R., Rubio-Avalos J.C. et. al. (2011). Effect of porosity on the absorbed, reemitted and transmitted light by a geopolymer metakaolin base. Materials Letters 65, 880-883.

Estudio a primeros principios de la medio metalicidad en nanoalambres de silicio

F. de Santiago, A.Trejo, M.Cruz-Irisson

Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacan
Av. Santa Ana 1000, 04430, México D.F., México.
E-mail: varelasdf@gmail.com

Desde la aparición del término "espintrónica" en 1996, se ha buscado desarrollar dispositivos que operen bajo este paradigma, en el que el comportamiento electrónico puede ser controlado a través del espín de los portadores y viceversa [1]. El desarrollo de estos nuevos dispositivos depende en gran medida del diseño de materiales novedosos que permitan la polarización del los canales de espín. Los medio-metales son materiales cuyas bandas prohibidas se comportan de forma diferente para cada canal de espín, lo cual hace posible esta polarización [2].
En este trabajo se investigan los efectos de enlaces sueltos (DBs) en la banda prohibida de nanoalambres de silicio (SiNWs). Los cálculos se realizaron dentro del marco de la teoría del funcional de la densidad (DFT), haciendo uso de la aproximación del gradiente generalizado (GGA) y el funcional revisado de Perdew–Burke–Ernzerhof (RPBE). Los SiNWs se modelan al remover los átomos fuera de una circunferencia en la dirección [001] de un cristal de silicio a través del método de superceldas [3], saturando los enlaces sueltos de la superficie con átomos de hidrógeno a excepción de los enlaces sueltos. Los SiNWs estudiados presentan un comportamiento medio-metálico, son aislantes para un canal de espín y metales para el canal de espín contrario. Los resultados obtenidos son significativos en el desarrollo de dispositivos espintrónicos que puedan aprovechar la tecnología existente para dispositivos electrónicos de silicio.

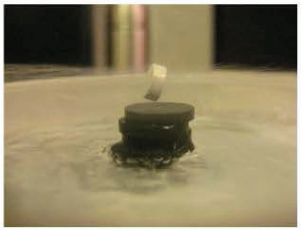
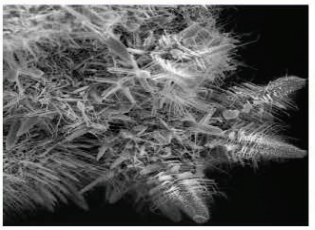
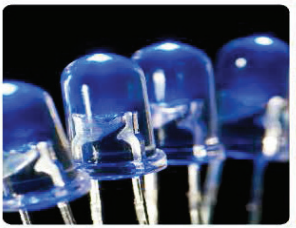
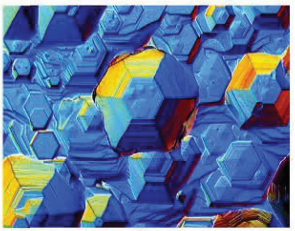
Referencias

[1] Pingale, J. S., Patil, M. D., Masumdar, U. I. (2013). *Utilization of Spintronics*. International Journal of Scientific and Research Publications (IJSRP), Vol. 3, Issue 6.
[2] Fong, C., Shaughnessy, M., Damewood, L., et al. (2012). *Theory, Experiment and Computation of Half Metals for Spintronics: Recent Progress in Si-based Materials.* Nanoscale Systems: Mathematical Modeling, Theory and Applications, Vol. 1, Páginas 1-22.
[3] Trejo A., Cruz-Irisson M.. (2013). *Computational modeling of the size effects on the optical vibratrional modes of H-terminated Ge Nanostructures*. Molecules (**18**), 4476–4785.

Notas

Notas

Notas

Comité Organizador Local

Yesenia Arredondo León (ENES Unidad Morelia UNAM)
Oracio Navarro CHávez (IIM-Morelia, UNAM)
Alan Dierick Ortega Gutiérrez (IIM- UNAM)

SMF
Sociedad Mexicana de Física

CONACYT

ESCUELA NACIONAL de ESTUDIOS SUPERIORES