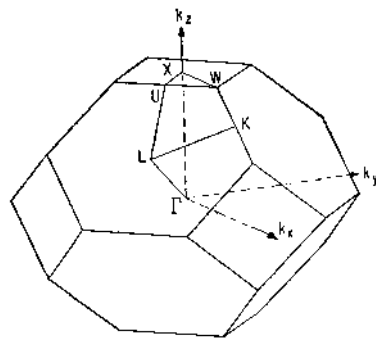




# Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular



2012



## Índice

Índice .....	3
Instituciones organizadoras y patrocinadoras .....	5
Comité Organizador .....	5
Algunos datos de carácter organizativo .....	5
Programa .....	7
Lunes 9 de enero. Presiden: LM Gaggero Sager y R. Pérez Álvarez .....	7
Martes 10 de enero. Presiden: Osvaldo Vigil Galán y JL Peña .....	8
Miércoles 11 de enero. Presiden: ME Mora Ramos y J Rubayo Soneira.....	9
Jueves 12 de enero, Universidad Iberoamericana, Auditorio Fernando Bustos Barrena S.J., Edificio S, 2do nivel. Presiden: Alejandro Mendoza Álvarez y LM Gaggero Sager .....	10
TÍTULOS Y RESÚMENES .....	11
CONFERENCIAS.....	13
CARTELES.....	49



## Instituciones organizadoras y patrocinadoras

1. Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM)
2. Universidad Iberoamericana
3. *European Physical Society*
4. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (BUAP)
5. Universidad Autónoma de Zacatecas (UAZ)
6. Red Temática de Cuerpos Académicos *Excitaciones Elementales en Sistemas Multicapas*.

## Comité Organizador

1. Dr. Rolando Pérez Álvarez (UAEM)
2. Dr. Luis M. Gaggero Sager (UAEM)
3. Dr. Miguel E. Mora Ramos (UAEM)
4. Dra. Leonor Chico Gómez (ICMM-CSIC, España)
5. Dr. Osvaldo Vigil Galán (IPN)
6. Dr. Juan Carlos Martínez Orozco (UAZ)
7. Dr. Alejandro Mendoza Álvarez (Univ. Iberoamericana)

## Algunos datos de carácter organizativo

1. El 5to Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular tendrá lugar del 9 al 12 de enero de 2012. Del lunes 9 al miércoles 11 sesionaremos en el hotel Los Belenes de Cuernavaca, C. Coronel Ahumada No. 413, Colonia Los Volcanes, Cuernavaca. El jueves 12 trasladaremos nuestras sesiones al auditorio "Fernando Bustos Barrena", edificio S, 2do piso, Universidad Iberoamericana (Prolongación Paseo de la Reforma 880, Lomas de Santa Fe, Distrito Federal).
2. El Comité Organizador ha reservado prácticamente todo el hotel Los Belenes. Rogamos a los participantes nos avisen qué día van a llegar y qué día se retiran. El uso de este hotel incluye desayuno, comida y cena.
3. A los participantes que se hospeden fuera de Los Belenes, el Comité Organizador los invita a la comida y a los cafés.
4. Los organizadores hacemos un esfuerzo por crear en el Taller un clima relajado de intercambio de ideas y experiencias por lo que la parte protocolar y de exigencias formales está reducida a lo que el sentido común indica como imprescindible.
5. Los participantes nos han proporcionado el título, autores y resumen de sus trabajos. Estos pueden estar en inglés o español y no hemos puesto exigencias de formato y extensión; los autores pueden guiarse por su sentido común y normas usuales en estos casos. Las exposiciones pueden también ser en cualquiera de estas lenguas. De acuerdo a la experiencia de los Talleres anteriores, muchos expositores optan por hablar en español pero sus presentaciones –de *power point* típicamente- están en inglés.
6. Sugerimos que los autores de carteles los pongan apenas lleguen al Taller; el mismo lunes, de preferencia. De este modo, aunque hemos previsto una sesión de carteles, los participantes tendrán más tiempo para verlos.

7. En esta edición del Taller tendremos todo un día (martes 10) dedicado a las Energías Renovables. La organización de esta parte del Taller corre a cargo del Dr. Osvaldo Vigil Galán ([osvaldo@esfm.ipn.mx](mailto:osvaldo@esfm.ipn.mx)).
8. No publicamos los trabajos en extenso. Pero, por iniciativa de algunos participantes, los organizadores del Taller, hemos coordinado la publicación de un libro de monografías con el título "*Some current topics in Condensed Matter Physics (2011)*". Estas monografías no tienen que corresponderse necesariamente con los trabajos presentados ni autores participantes en el Taller. Para 2012 pretendemos hacer lo mismo, pero debe entenderse que este es un esfuerzo independiente del Taller. Los autores interesados en que aparezca su trabajo en extenso en el Libro que publicaremos posterior al Taller, deben enviarnos el material cuanto antes. Fecha tope: 1 de mayo 2012.
9. Éstas y otras informaciones pueden verse en nuestra página web: <http://web.fc.uaem.mx:8080/~tallerfmcm/>
10. **El programa está muy apretado. Exhortamos a todos los participantes a contribuir al cumplimiento del horario.**

## Programa

Lunes 9 de enero. Presiden: LM Gaggero Sager y R. Pérez Álvarez

Horario	Título	Autores
10:00-11:00	Metafluid with anisotropic dynamic mass	J. Arriaga
11:00-11:30	Recent Progress in the codes implementing Density Functional Theory	J.A. Camargo and R. Baquero
11:30-12:00	Heteroestructuras de silicio poroso: evaluación de la sensibilidad óptica de moléculas	K. S. Pérez Aguilar, J. O. Estévez, G. Palestino, A. Méndez-Blas, J. Arriaga
12:00-12:30	<b>RECESO</b>	
12:30-13:00	2D massless QED Hall half-integer conductivity and graphene	A. Pérez Martínez, E. Rodríguez Querts, H. Pérez Rojas, R. Gaitán and S. Rodríguez-Romo
13:00-13:30	Transmission, transport and electronic-structure properties of monolayer, bilayer and trilayer asymmetric graphene diodes	I. Rodríguez-Vargas, J. Madrigal-Melchor
13:30-14:00	Estudio teórico de las propiedades ópticas no lineales en un potencial asimétrico formado por un pozo delta-dopado de impurezas tipo n en GaAs en la vecindad de una barrera de Schottky	Juan Carlos Martínez Orozco
14:00-14:30	Singularidades de polarización en condensados polaritónicos	M. Toledo Solano, M. E. Mora-Ramos, Y. G. Rubo
14:30-16:00	<b>COMIDA</b>	
16:00-16:30	Homogeneización, relaciones universales y coeficientes efectivos de estructuras perforadas magnetoelásticas.	Julián Bravo-Castillero, Reinaldo Rodríguez Ramos, Raúl Guinovart-Díaz, Houari Mechkour, Renald Brenner, Hector Camacho Montes, FJ Sabina.
16:30-17:00	Caracterización de las propiedades efectivas de compuestos fibrosos con adhesión imperfecta	Raúl Guinovart Díaz, Reinaldo Rodriguez Ramos, Juan Carlos López Realpozo, Julián Bravo Castillero, José Antonio Otero Hernández, Federico J. Sabina.
17:00-17:30		
17:30-18:00		

## Martes 10 de enero. Presiden: Osvaldo Vigil Galán y JL Peña

Horario	Título	Autores
10:00-11:00	Un estudio sobre los resultados y perspectivas de las nuevas celdas solares basadas en kesteritas	O.Vigil-Galán
11:00-11:30	Efectos de una banda intermedia en el CdTe por incorporación de Bi para celdas solares de CdTe/CdS.	E Sánchez-Meza, O. Vigil-Galán,
11:30-12:00	Procesamiento y caracterización de celdas solares del tipo CdS/CdTe mediante materiales sinterizados en forma de pastillas como paso previo de escalamiento industrial.	J. Santoyo-Morales, O.Vigil-Galán, E. Franco, M. Espindola,E. Marin
12:00-12:30	Deposito de Bi-capas de SnO <sub>2</sub> para ser usadas como contactos frontales en celdas solares.	E. F. García ; O. Vigil-Galán; J. Santoyo
12:30-13:00	<b>RECESO</b>	
13:00-13:30	Dopamiento de películas policristalinas de CdTe a partir de la heteroestructura CdTe/Al	Marcelino Becerril, Osvaldo Vigil-Galán, Gerardo Contreras-Puente, and Orlando Zelaya-Angel
13:30-14:00	Estudios sobre el depósito electroquímico de películas delgadas de CuInSe <sub>2</sub> para aplicaciones en celdas solares	Ma. Estela Calixto <sup>1</sup> , C. Castillo Abriz <sup>1</sup> , Antonio Méndez Blas <sup>1</sup> , S. de la Luz Merino <sup>1</sup> , B. Mari-Soucase <sup>2</sup> y L. Ortiz Romo <sup>2</sup>
14:00-14:30	High Efficiency Thin Films CdS/CdTe Solar Cells Activated with Freon Gas	J. L. Peña, A. Rios-Flores, O. Arés, Juan M. Camacho, V. Rejón.
14:30-15:00	Rayado de películas de CdTe por medio de un diodo láser	D. Jiménez Olarte, G. Contreras-Puente, O. Vigil-Galán, A. Arce-Plaza
15:00-16:30	<b>COMIDA</b>	
16:30-18:00	Reunión sobre estrategias de las investigaciones en materiales fotovoltaicos en México	Moderador: Dr. Osvaldo Vigil Galán.



## Miércoles 11 de enero. Presiden: ME Mora Ramos y J Rubayo Soneira

Horario	Título	Autores
10:00-10:30	La estabilidad del trímero de berilio, Be <sub>3</sub> : Un estudio <i>benchmark</i> CASSCF+ACPF	A. Ramírez-Solís, J.I. Amaro-Estrada.
10:30-11:00	Tetrámero de oxígeno molecular (O <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> : Fuerzas intermoleculares y la fase sólida epsilon	M. Bartolomei, E. Carmona, M. Hernández, J. Pérez, J. Campos, Ramón Hernández L.
11:00-11:30	Física Molecular y Resonancia Magnética Nuclear	Carlos Amero
11:30-12:00	Plegarse o agregarse, esa es la cuestión. La historia de JTO y WIL, dos proteínas muy similares con comportamientos muy diferentes.	Nina Pastor y César Millán
12:00-12:30	<b>RECESO</b>	
12:30-13:00	Dinámica de fragmentación de agregados de van der Waals	Mario Hernández-Vera, Olivia Borrel-Grueiro, Maykel Márquez-Mijares, Ernesto Quintas-Sánchez, Pedro Pajón-Suárez, Ramón Hernández-Lamoneda, Jesús Rubayo-Soneira
13:00-13:30	Estudio de las propiedades ópticas de espejos omnidireccionales de silicio poroso para aplicaciones como reflectores laser	J. O. Estevez, K. Pérez, J. Arriaga, A. Méndez Blas, D. Mayorga, V. Agarwal
13:30-14:00	Espejos dieléctricos omnidireccionales en la región visible	A. David Ariza-Flores, L.M. Gaggero-Sager, and V. Agarwal
14:00-14:30	Oscilaciones en cables cuánticos recubiertos	D.G. Santiago-Pérez, C. Trallero-Giner, R. Pérez-Álvarez, L. Chico, R. Baquero y G.E. Marques
14:30-16:00	<b>COMIDA</b>	
16:00-16:30	Tiempo de tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor	D. Villegas, F. de León Pérez y R. Pérez Álvarez <sup>3</sup>
16:30-	<b>SESIÓN DE CARTELES</b>	

**Jueves 12 de enero, Universidad Iberoamericana, Auditorio Fernando Bustos Barrena S.J., Edificio S, 2do nivel. Presiden: Alejandro Mendoza Álvarez y LM Gaggero Sager**

Horario	Título	Autores
10:00-10:30	Procesos avanzados de oxidación aplicados al tratamiento de aguas	Rubén César Vásquez Medrano
10:30-11:00	Membranas inteligentes de porosidad controlada por variación en la temperatura y el pH.	R.F. Estrada, E. Sánchez-Aguilera.
11:00-11:30	Síntesis y Propiedades de Transporte de Gases en Membranas basadas en Polímeros Orgánicos e Híbridos	Dr. Alberto Ruiz Treviño
11:30-12:00	<b>Receso</b>	
12:00-12:30	La Búsqueda del Bosón de Higgs: desde sus inicios hasta los últimos resultados: Un enfoque experimental	Salvador Carrillo
12:30-13:00	Análisis de procesos de dispersión de fotones por modos acústicos en fluidos relativistas: Primeras simulaciones numéricas	Dominique Brun Battistini
13:00-13:30	A review a set of results concerning Thomas-Fermi like universalities in the energy spectra of semiconductor quantum dots and atomic ions	Augusto González
13:30-14:00	<b>CLAUSURA</b>	
14:00	<b>VINO Y CANAPÉS CORTESÍA DE LA UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA</b>	

## **TÍTULOS Y RESÚMENES**



## **CONFERENCIAS**



QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

LUNES 9

**CONFERENCIA MAGISTRAL**

**Metafluid with anisotropic dynamic mass**

J. Arriaga

Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla  
18 Sur y San Claudio, Edif. 110 B, Ciudad Universitaria,  
72570, Puebla, México.

Anisotropy is a property which is usually associated with crystal solids. Fluids and glasses are naturally isotropic in the absence of external fields. Anisotropy may, however, be artificially stimulated by embedding periodic structures in naturally isotropic fluids. Then these artificial structures — so called phononic crystals — may have very unusual properties [1]. Within a narrow band of frequencies of sound the effective mass and the effective elastic modulus of specially designed phononic crystals may become anisotropic, take negative values, or acquire abnormally large imaginary part. Due to such “strange” properties that do not exist for natural materials these artificial structures are usually called *metamaterials* or *metafluids*. We show that a fluid filling the space between metallic cylinders arranged in a two-dimensional lattice exhibits anisotropic dynamic mass for sound waves propagating through the lattice, if its unit cell is anisotropic. Using the plane-waves expansion method we derive (in the long wavelength limit) a formula for the effective mass tensor of the metafluid. The proposed formula is very general, it is valid for arbitrary Bravais lattices and arbitrary filling fractions of the cylinders. We apply our method to a periodic structure with very high anisotropy, when other known methods fail. In particular, we calculate the effective mass tensor for sound waves in air with embedded lattice of aluminum cylinders having rectangular cross sections, and obtain excellent agreement with experiment. The proposed method of calculation may find numerous applications for tailoring of metafluids with prescribed anisotropy.

[1] T. Gorishny, M. Maldovan, C. Ullal, and E. Thomas, *Physics World* **18**, 24 (2005).

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**LUNES 9**

CONFERENCIA 02

**Recent Progress in the codes implementing Density Functional Theory**

J.A. Camargo and R. Baquero

Departamento de Física, CINVESTAV-IPN, Av. IPN 2508, 07360 México

It is known that one of the traditional short comes of the codes based on Density Functional Theory is its impossibility to account for the band gap of semiconductors. This is the case of several known codes as Abinit, Siesta, Hamilt, and others. It is also the case for Wien2K. Very recently, in the so call codeWien2011, this difficulty was overcome. In this paper, we report our analysis of this recent progress. We have calculated, using this code, the band structure of several semiconductors and found an important improvement in the overall agreement with experiment which remains nevertheless in some very few cases as big as 20% off. In spite of it, this new progress opens the possibility for surface and interface calculations involving semiconductors which were not possible with the necessary accuracy using the former versions of any code implementing Density functional Theory and therefore some important findings remained uncertain. Further, the recommendation to optimize within the Local Density Approximation and to use the lattice constant found in this way into the new code to proceed with a calculation is analyzed in detail and found appropriate. It remains, nevertheless, according to us, as a point to fix in more detail in the future.

PACS numbers: 71.15.Mb; 71.20.Mq;71.20.Nr;71.20.Be

Keywords: TB-MBJLDA potential; semiconductors, band gap; Wien2k 2011.



**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

**LUNES 9**

CONFERENCIA 03

**Heteroestructuras de silicio poroso: evaluación de la sensibilidad óptica de biomoléculas**

K. S. Pérez Aguilar<sup>a</sup>, J. O. Estévez<sup>a</sup>, G. Palestino<sup>b</sup>, A. Méndez-Blas<sup>a\*</sup>, J. Arriaga<sup>a</sup>

(a) Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48, C.P. 72570, Puebla, Pue., México. (b) CIEP-FCQ, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Zona Universitaria, C.P. 78210, San Luis Potosí, México.

(\*)Corresponding autor: [amendez@ifuap.buap.mx](mailto:amendez@ifuap.buap.mx)

El Silicio Poroso es un material biocompatible y biodegradable que presenta un gran área superficial específica ( $>100 \text{ m/cm}^2$ ), lo cual lo hace un excelente candidato para su uso en aplicaciones de biosensado<sup>[1]</sup>. Aunado a esto, las propiedades ópticas que presenta como un índice de refracción efectivo y la modulabilidad de parámetros de crecimiento permite la obtención de estructuras fotónicas complejas, como lo son los cristales fotónicos (CF) que son estructuras periódicas que se construyen al alternar capas con diferentes índices de refracción y que presentan una banda prohibida fotónica<sup>[2]</sup>; y los cuasicristales (CC) que forman una clase de sistemas en el régimen intermedio entre periódicos y desordenados, los cuales al ser combinados con estructuras periódicas, dan como resultado la formación de heteroestructuras híbridas (periódicas/cuasi-regulares)<sup>[3]</sup>.

En este trabajo se analiza la sensibilidad de dos heteroestructuras unidimensionales fabricadas a partir de silicio poroso, usando como referencia los modos localizados de luz que presentan debido al rompimiento de la periodicidad de las estructuras. En el primer caso se construyó una estructura doblemente periódica (DP)<sup>[4]</sup> con una configuración  $A_n B_m A_n B_m A_n B_m \dots A_n B_m = (A_n B_m)^N$ , donde  $A$  y  $B$  son subestructuras compuestas de dos periodos unitarios diferentes. Las estructuras DP muestran una banda prohibida fotónica con  $(N-1)$  resonancias fuertemente localizadas. La segunda heteroestructura esta compuesta por una subestructura cuasiregular (FN) que cumple la relación de Fibonacci ( $F_M = F_{M-1} + F_{M-2}$ ) acoplada entre dos subestructuras periódicas tipo Bragg (EB) de orden  $N$ , teniendo la configuración  $(EB)^N - (FN)^M - (EB)^N$ . También en este caso se presentan fuertes resonancias cuyo número depende del orden de la subestructura FN, es decir  $M$ .

Para evaluar la sensibilidad de las heteroestructuras como biosensores, se usaron 3 moléculas biológicas: Glucosa Oxidasa (GOX), Fluoresceína (FSE) y Prolactina (PRL). La respuesta óptica de las heteroestructuras se evaluó por reflectancia especular, donde se monitoreó la localización de los modos de transmisión que se desplazan debido a la infiltración molecular.

[1] G. Palestino, M. Martin, V. Agarwal, R. Legros, T. Cloitre, L. Zimányi, C. Gergelly. Phys. Status Solidi C. 6, 7, 1624 (2009).

[2] Mher Ghulinyan et al., Phys. Rev. B, 71, 094204 (2005).

[3] J. Escorcia-García, C.A. Duque, M.E. Mora-Ramos. Superlattices and Microstructures (2010).

[4] K. Pérez et al., J. Opt. Soc. Am. B, doc. ID 152861 (posted 14 December 2011, in press).

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

LUNES 9

CONFERENCIA 04

**2D massless QED Hall half-integer conductivity and graphene**

A. Pérez Martínez<sup>1</sup>, E. Rodríguez Querts<sup>1,2</sup>, H. Pérez Rojas<sup>1</sup>, R. Gaitán<sup>1</sup> and S. Rodríguez-Romo<sup>1</sup>

1: Departamento de Física Teórica, ICIMAF, La Habana, Cuba. 2: Departamento de Física, UAM-Iztapalapa, México D.F.

We study a simple model of a charged fermion-antifermion plasma in a magnetic field which is also interacting perturbatively with an electromagnetic wave. The study was done by using the methods of finite temperature quantum field theory in the search of its kinetic properties. Starting from the photon self-energy tensor in a magnetized medium, the 3D complete antisymmetric form of the conductivity tensor is found in the static limit of a fermion system  $C$  non-invariant under fermion-antifermion exchange. The massless relativistic 2D fermion limit in QED is derived by using the compactification along the dimension parallel to the magnetic field. In the static limit, it is found that the conductivity tensor is given by a complete antisymmetric expression for the 3D as well as 2D cases. In this limit and at zero temperature the main features of quantum Hall effect (QHE) are obtained: the half-integer QHE and the minimum value proportional to  $e^2/h$  for the Hall conductivity. For typical values of graphene the plateaus of the Hall conductivity are also reproduced.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

**LUNES 9**

CONFERENCIA 05

**Transmission, transport and electronic-structure properties of monolayer, bilayer and trilayer asymmetric graphene diodes**

I. Rodríguez-Vargas and J. Madrigal-Melchor

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

We study the transmission, transport and electronic-structure properties of monolayer, bilayer and trilayer graphene diodes. The graphene diode system is built sitting graphene layers on alternating substrates such as SiO<sub>2</sub> and SiC which are capable of non-open and open an energy bandgap on graphene. The transfer matrix approach is used to obtain the transmittance, linear regime conductance and electronic structure for different set parameters such as electron energy, electron incident angle, barrier and well widths. Particular attention is paid to the asymmetric characteristics of the graphene diodes as well as to the main differences between monolayer, bilayer and trilayer systems. We find that: 1) the transmission properties can be modulated readily changing the energy and angle of the incident electrons, the widths of the well and barrier regions; 2) the linear regime conductance shows various regions of Negative Differential Conductance (NDC) which are easily enhancing, diminishing and shifted changing from symmetric to asymmetric diode configuration; 3) the conductance peaks responsible for NDC are directly related to confine states in these graphene structures. It is also note that under particular conditions there is a crossover between the transport properties of monolayer and bilayer graphene diodes. As a final remark, it is important to mention that the present proposal seems to be possible considering the sophistication of the current epitaxial growth techniques and whenever substrates that open an energy bandgap on graphene, without diminishing the carrier's mobility, be experimentally discovered.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**LUNES 9**

CONFERENCIA 06

**Estudio teórico de las propiedades ópticas no lineales en un potencial asimétrico formado por un pozo delta-dopado de impurezas tipo  $\delta$  en GaAs en la vecindad de una barrera de Schottky**

J.C. Martínez-Orozco<sup>a</sup> ([jcmover@fisica.uaz.edu.mx](mailto:jcmover@fisica.uaz.edu.mx)), I. Rodríguez-Vargas<sup>a</sup>, M. E. Mora-Ramos<sup>b</sup> y C. A. Duque<sup>c</sup>

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

b: Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av. Universidad 1001, 62209, Cuernavaca, Mor., México

c: Instituto de Física, Universidad de Antioquia, AA 1226, Medellín, Colombia

En esta plática presentamos algunos de nuestros resultados teóricos del cálculo de propiedades ópticas lineales y no lineales; coeficiente de absorción óptica, cambio del índice de refracción relativo así como la generación de segundos (SHG) y terceros armónicos (THG) para el caso del potencial de un pozo delta-dopado de impurezas tipo n en una matriz de GaAs con una barrera de Schottky en su vecindad.

Presentamos estos resultados tomando en cuenta los efectos de la presión hidrostática, en el rango de bajas presiones (0 - 6 kbar), tanto en el alto de la barrera de Schottky por medio de una relación experimental de  $\phi_b(P)$  [1] así como en el potencial producido por el pozo delta-dopado de impurezas a través de la dependencia de los parámetros básicos de material (masa efectiva  $m^*(P)$ , constante dieléctrica  $\epsilon_s(P)$ ). Presentamos la dependencia que tienen las propiedades ópticas no lineales, mencionadas anteriormente, con la presión hidrostática, campo eléctrico, así como en función de los parámetros del sistema que son la densidad de impurezas del pozo delta-dopado de impurezas ( $N_{2D}$ ) y el alto de la barrera de Schottky ( $\phi_b(P)$ ).

Comparamos nuestros resultados con un trabajo teórico similar previo [2] y discutimos algunas ideas de trabajos futuros en esta línea de investigación.

[1] Cankaya G. and N. Uçar and E. Ayyildiz and H. Efeoglu and A. Türüt and S. Tüzemen and S. and Y. K. Yogurtcu, Phys. Rev. B. **60** 15944 (2008).

[2] I. Saidi and L. Bouzaïene and H. Maaref and H. Mejri, J. Appl. Phys. **101** 094506 (2007).

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**LUNES 9**

CONFERENCIA 07

**Singularidades de polarización en condensados polaritónicos**

M. Toledo Solano<sup>a</sup> (miller@uaem.mx), M. E. Mora-Ramos<sup>a</sup> y Y. G. Rubo<sup>b</sup>

a: Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 62209, Cuernavaca Morelos,  
México

b: Centro de Investigación en Energía, Universidad nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos  
62580, México

Nosotros estudiamos las propiedades fundamentales de los vórtices como singularidades de polarización en condensados de excitón-polaritón en microcavidades semiconductoras. La topología del campo de polarización se obtiene de la matriz de

polarización asociada con el parámetro de orden o pseudoespín del condensado polaritónico. A primer orden, las singularidades se presentan en la forma de puntos degenerados y pueden ser clasificados como puntos trisectores o puntos cuña. Este estudio confirma que estas singularidades tienen, de hecho, carga topológica semi-entera, ratificando su naturaleza de vórtices semienteros, caracterizados por una rotación de  $\pi$  en los ángulos de fase y de polarización al rodear sus núcleos [1,2]. El tipo de singularidad de la polarización depende particularmente en el valor de la separación TE-TM "(TE- TM splitting)" en el sistema.

[1] Y. G. Rubo, Phys. Rev. Lett, 99, 106401 (2007)

[2] K. G. Lagoudakis et al. Science, 326, 974 (2009)

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**LUNES 9**

CONFERENCIA 08

**Homogeneización, relaciones universales y coeficientes efectivos de estructuras perforadas  
magnetoelásticas**

Julián Bravo-Castillero, Reinaldo Rodríguez Ramos, Raúl Guinovart-Díaz,

(Facultad de Matemática y Computación. Universidad de La Habana, San Lázaro y L,

Vedado, CP 10400. Habana 4, Cuba)

Houari Mechkour (Ecole Centrale d'Electronique (ECE-Paris), Quai de Grenelle-CS 71520, 75725, Paris  
Cedex 15, France)

Renald Brenner (Laboratoire des Propriétés Mécaniques et Thermodynamiques des Matériaux, CNRS,  
Université Paris Nord, 93430 Villetaneuse, France)

Hector Camacho Montes (Instituto de Ingeniería, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Av. Del  
Charro 610, Norte Ciudad Juárez, Chihuahua 32310, México)

FJ Sabina (Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas, Universidad Nacional  
Autónoma de México, Apartado Postal 20{726, Delegación de \_ Álvaro Obregón, 01000 México, D.F.,  
México)

Se aplica el método de homogeneización a doble escala para obtener las ecuaciones homogeneizadas que modelan el comportamiento global de un compuesto magnetoelástico (MEE) tridimensional cuya microestructura posee perforaciones periódicamente distribuidas. El problema homogeneizado es analizado para el caso particular de materiales porosos formados por fibras cilíndricas vacías en una matriz MEE transversalmente isótropa y homogénea. Para esta clase de compuestas se obtienen relaciones universales entre los coeficientes efectivos sin la necesidad de imponer restricciones adicionales sobre su comportamiento global. Se obtienen fórmulas analíticas explícitas, y simples de calcular, para el caso del comportamiento global transversalmente isótropo. Comparaciones con resultados de otros modelos (numérica y micromecánica) de homogeneización muestran la eficiencia de las formulas obtenidas.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

**LUNES 9**

CONFERENCIA 09

**Caracterización de las propiedades efectivas de compuestos fibrosos con adhesión imperfecta**

Raúl Guinovart Díaz, Reinaldo Rodríguez Ramos, Juan Carlos López Realpozo, Julián Bravo Castellero  
Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, Habana, Cuba

José. Antonio Otero Hernández

Instituto de Cibernética, Matemática y Física. ICIMAF. La Habana, Cuba

Federico J. Sabina

Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas, UNAM, DF, México

La determinación de las propiedades de materiales compuestos en muchos casos no considera los efectos que se producen en las zonas de interacción de las constituyentes, es decir, se considera una unión perfecta entre las fases, lo que significa que las tracciones y los desplazamientos son continuos a través del interfaz. Sin embargo, en muchos casos de interés la interfaz perfecta no es un modelo adecuado. Una tal situación es la presencia de una capa delgada, envolviendo a los refuerzos, que se origina debido a las interacciones químicas entre los componentes o puede ser introducido en el diseño a fin de mejorar las propiedades del compuesto. El reconocimiento de la interfaz como tal implica que el compuesto es considerado como un material de tres componentes. Tal descripción requiere el conocimiento de las propiedades de la fase intermedia, información que no se conoce. Un modelo alternativo está basado en el reconocimiento que si la interfaz debe tener un efecto significativo en las propiedades del compuesto, sus propiedades deben ser considerablemente diferentes de aquellas que conforman el material bajo estudio, en general son mucho más flexibles. Entonces el efecto de la interfaz puede ser interpretado como un salto de desplazamiento cruzando la interfaz del refuerzo a la matriz mientras las tracciones deben permanecer continuas, éstas son consideraciones de equilibrio simples para que no se produzcan roturas. En la representación más simple los saltos en el desplazamiento normal y tangencial son proporcionales a los componentes de tracción asociados (esquema tipo resorte). En este trabajo, hemos considerado en particular un compuesto fibroso periódico de dos fases, donde las componentes son materiales transversalmente isotrópicos. Las celdas periódicas son paralelogramos. El contacto entre las fases es modelado a través de un esquema tipo resorte. Por medio del método de homogeneización asintótica fueron obtenidas las expresiones analíticas que caracterizan a las propiedades globales de este tipo de compuesto. Algunos ejemplos numéricos y comparaciones con otros resultados teóricos ilustran que las fórmulas obtenidas para predecir estas propiedades son sencillas y eficientes.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**MARTES 10**

CONFERENCIA 01

**Título: Un estudio sobre los resultados y perspectivas de las nuevas celdas solares basadas en kesteritas**

Oswaldo Vigil Galán

Escuela Superior de Física y Matemáticas – I.P.N., Edificio No. 9 U.P.A.L.M. 07738 México D. F., México

En los últimos años la comunidad científica internacional relacionada con el procesamiento de celdas solares y en particular en celdas solares policristalinas a películas delgadas, llamadas de la segunda generación, realiza ingentes esfuerzos por sustituir los compuestos absorbedores tradicionales CdTe y CIGSSe, por compuestos formados por elementos no tóxicos y abundantes, que garanticen el procesamiento de módulos fotovoltaicos lo más amigables posible con el medio ambiente y de una producción sostenida de los mismos. Dentro de las propuestas de nuevos absorbedores los compuestos del tipo  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  (CZTS),  $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$  (CZTSe) y  $\text{Cu}_2\text{ZnSnSSe}_4$  (CZTSSe) son los más estudiados en la actualidad por sus propiedades físicas, adecuadas para su uso en las celdas solares. El CZTS ha sido procesado por varias técnicas. En este trabajo se analiza los resultados obtenidos en los últimos años y los avances en el grupo de celdas solares de la ESFM-IPN en colaboración con el El Laboratorio de Materiales y Sistemas Solares, del Instituto de Investigación en Energía de Cataluña (IREC).



QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

MARTES 10

CONFERENCIA 02

**Efectos de una banda intermedia en el CdTe por incorporación de Bi para celdas solares de CdTe/CdS.**

E Sánchez-Meza, O. Vigil-Galán,

Escuela Superior de Física y Matemáticas – I.P.N., Edificio No. 9 U.P.A.L.M. 07738 México D. F., México

En recientes años se han realizados esfuerzos para crear una banda intermedia (MIB) o multibanda en diferentes materiales semiconductores que permita absorber fotones en la región infrarroja del espectro solar y por tanto incrementar la eficiencia de las celdas solares sin adicionar semiconductores con brecha de energía prohibida menor en forma de estructuras “tamden”. El CdTe:Bi es uno de estas opciones para celdas solares del tipo CdTe/Cds. En este trabajo se presenta el estudio de Bi incorporado en CdTe en una concentración  $1 \times 10^{17} \text{ cm}^{-3}$  como posible candidato para un material de MIB a través de técnicas como fotorefectancia y efecto Quenching. Se mostraran los efectos de la posible banda intermedia en el dispositivo CdTe/CdS evaluando la respuesta espectral del dispositivo y mediciones de I-V.

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

MARTES 10

CONFERENCIA 03

**Procesamiento y caracterización de celdas solares del tipo CdS/CdTe mediante materiales sinterizados en forma de pastillas como paso previo de escalamiento industrial.**

J. Santoyo-Morales<sup>1</sup>, O.Vigil-Galán<sup>2</sup>, E. Franco<sup>2</sup>, M. Espindola<sup>1</sup>, E. Marin<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada (CICATA),*

<sup>2</sup>*Instituto Politécnico Nacional (IPN), Legaria 694, Col. Irrigación, C.P. 11500, México D.F., México, ce, Escuela Superior de Física y Matemáticas (ESFM), IPN, C.P. 07738, México D.F., México.*

Se procesaron celdas solares de película delgada del tipo CdS y CdTe por la técnica de Transporte de Vapor en Espacio cerrado con paredes calientes (CSV-T-HW) utilizando materiales fuente sinterizados en forma de pastilla. De tal modo que películas de CdS, de aproximadamente 80-120nm de espesor, fueron depositadas sobre sustratos de vidrio conductor (SnO<sub>2</sub>:F)/buffer (SnO<sub>2</sub>) utilizando material fuente de CdS sinterizado en forma de pastilla con una pureza del 99.999%, estas películas fueron expuestas a un tratamiento térmico de CdCl<sub>2</sub> sinterizado también como pastilla. Posteriormente películas de CdTe fueron depositadas sobre la capa de CdS por el proceso CSV-T-HW usando material fuente de CdTe de una pureza del 99.99% sinterizado en forma de pastilla con un postratamiento térmico en CdCl<sub>2</sub> sinterizado como pastilla y depositados sobre el CdTe. De esta forma todas las películas fundamentales de la celda solar son depositadas a partir de pastillas sinterizadas. Para la elaboración de las celdas solares se adicionaron contactos eléctricos posteriores de Cu<sub>x</sub>Te. Este procedimiento es un paso previo en el procesamiento de estos dispositivos sin romper vacío y de un proceso de escalamiento industrial.

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

MARTES 10

CONFERENCIA 04

**Depósito de Bi-capas de SnO<sub>2</sub> para ser usadas como contactos frontales en celdas solares.**

E. F. García ; O. Vigil-Galán; J. Santoyo

e-mail: sparda\_lalo@hotmail.com

El uso de un óxido transparente de alta resistencia (buffer) en unión de un óxido transparente de baja resistividad o TCO se ha encontrado para como una mejorar de la eficiencia de celdas solares de CdS /CdTe utilizando CdS con espesor inferior a 100 nm. Los TCO más comúnmente utilizados son SnO<sub>2</sub>: F e ITO, por sus propiedades electro-ópticas, estabilidad química y térmica, siendo el SnO<sub>2</sub>: F el material que ofrece las mejores propiedades en proporción al costo. Aunque la realización comercial del SnO<sub>2</sub>: F de vidrio, está disponible a bajo costo, por lo general parte de la superficie no proporcionan propiedades morfológicas adecuadas para las aplicaciones de las celdas solares. Cuando se produce esta situación, la depósito de una capa delgada sobre el TCO con un espesor adecuado mejora sus propiedades morfológicas y al mismo tiempo las propiedades de la estructura TCO / buffer / CdS en sus aplicaciones fotovoltaicas.

La metodología para la mejora de la morfología de la película con las correspondientes propiedades electro-ópticas de los TCO comerciales, a través del depósito de capas buffer de SnO<sub>2</sub>, por medio del método de depósito spray pirólisis, así como los resultados electro-ópticos y morfológicos de la estructura TCO / buffer / CdS fabricadas con estos bi-capas son presentados y discutidos.

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

MARTES 10

CONFERENCIA 05

**Dopamiento de películas policristalinas de CdTe a partir de la heteroestructura CdTe/Al**

Marcelino Becerril<sup>1</sup>, Osvaldo Vigil-Galán<sup>2</sup>, Gerardo Contreras-Puente<sup>2</sup>, and Orlando Zelaya-Angel<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física, CINVESTAV-IPN, Apdo. Postal 14-740, 07000 México D.F., México*

<sup>2</sup>*Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional, 07738 México D.F., México*

*Correspondence should be addressed to Marcelino Becerril, becerril@fis.cinvestav.mx*

Películas policristalinas de CdTe dopadas con aluminio fueron obtenidas a partir de la heteroestructura CdTe /Al/Vidrio Corning. El aluminio fue depositado por evaporación térmica en vacío y el CdTe por erosión catódica a partir de un blanco de CdTe. El aluminio fue introducido dentro de la red del CdTe por medio de un tratamiento térmico a partir de la heteroestructura CdTe/Al/Vidrio Corning. Las propiedades ópticas, eléctricas y estructurales fueron analizadas en función de la concentración de aluminio. Se encontró que cuando el Al es incorporado dentro de la red del CdTe, la resistividad disminuye y la concentración de portadores aumenta. En ambos casos los cambios son de varios órdenes de magnitud. De estos resultados se puede concluir que usando estas técnicas de deposición se pueden producir películas policristalinas de CdTe-Al *tipo n*.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

**MARTES 10**

CONFERENCIA 06

**Estudios sobre el depósito electroquímico de películas delgadas de CuInSe<sub>2</sub> para aplicaciones en celdas solares**

Ma. Estela Calixto<sup>1</sup>, C. Castillo Abriz<sup>1</sup>, Antonio Méndez Blas<sup>1</sup>, S. de la Luz Merino<sup>1</sup>, B. Mari-Soucase<sup>2</sup> y L. Ortiz Romo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48,  
Puebla, México, 72570

<sup>2</sup>Dpt. Física Aplicada-ETSED-IDF, Universitat Politècnica de València, Valencia, España

Debido a la crisis energética que se deberá enfrentar a nivel mundial por el eventual agotamiento de las reservas de petróleo, es imperativo buscar, desarrollar y aprovechar las fuentes alternas de energía disponibles, tales como la energía solar.

El Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> es uno de los materiales mas prometedores para aplicaciones en celdas solares de película delgada, las cuales ya han alcanzando eficiencias de conversión mayores del 20% a nivel laboratorio. Los dispositivos FV de mejor calidad son aquellos fabricados mediante técnicas que utilizan alto vacío como el depósito físico en fase vapor (PVD por sus siglas en inglés). Sin embargo, hay un interés en desarrollar técnicas de depósito alternativas que no involucren el uso de alto vacío, especialmente cuando se considera el escalamiento de procesos a nivel industrial. La técnica de depósito electroquímico o electrodeposición es una técnica alternativa y de bajo coste, ya que el procesamiento de materiales se lleva a cabo a presión atmosférica, temperatura ambiente, permite el depósito en áreas grandes, puede lograrse un buen control del espesor de las películas, es auto-purificante por lo que no necesita materiales de partida de alta pureza y tiene un alto potencial de utilización de especies en el baño. Por esta razón, se decidió utilizar la técnica de electrodeposición para realizar estudios sobre la preparación de las películas de CuInSe<sub>2</sub>, por lo que se darán a conocer algunos resultados de lo que se esta realizando actualmente en este tema y de manera general algunos resultados preliminares del proyecto "NanoCIS", proyecto financiado por el programa marco FP7 de la Unión Europea. En este proyecto participa un consorcio de 7 universidades incluyendo la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla de México .

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**MARTES 10**

CONFERENCIA 07

**High Efficiency Thin Films CdS/CdTe Solar Cells Activated with Freon Gas**

J. L. Peña, A. Rios-Flores, O. Arés, Juan M. Camacho, V. Rejón.

*Applied Physics Department, CINVESTAV-IPN Mérida, C.P. 97310, Mérida, Yucatán México, E-mail:*

*jlpena@mda.cinvestav.mx*

Currently there is a technology to manufacture CdS/CdTe thin film solar cells for a large scale production. These devices are already produced in modules of 60 x 120 cm<sup>2</sup> by two companies: Antec Solar in Germany and First Solar in the United States. The module conversion efficiency rose to 11.6% [1]. However these companies use the vapor transport deposition (VTD) as deposition technique for CdS and CdTe films. Also the CdCl<sub>2</sub> treatment is performed with an aqueous solution sprayed on CdTe film and subsequently treated in a belt furnace [2]. In recent years, N. Romeo et. al development a new method to make the heat-treatment in Chlorine atmosphere. For the Cl-treatment the CdS/CdTe structure is placed in an ambient containing a non toxic gas such as HCF<sub>2</sub>Cl. This innovation permits to obtain an efficiency of 14% [3]. The efficiency record (16.5%) was obtained on a small area cell (1 cm<sup>2</sup>) at the National Renewable Laboratory (NREL) [4] and it is know that the highest efficiency solar cells were prepared using close space sublimation (CSS) technique. The present work reports a simple process to obtain CdS/CdTe thin film solar cells with high efficiencies between 14 and 14.6%. The procedure consists in a sequentially deposit by RF sputtering and CSS of several layers onto a glass substrate, configured as glass/ITO/ZnO/CdS/CdTe/Cu/Mo. The CdTe layer was deposited at low substrate temperature (500 °C) under Ar-O<sub>2</sub> atmosphere by CSS, the CdS film is not intentionally treated and the activation process is performed with Freon gas such as HCF<sub>2</sub>Cl.

[1] <http://investor.firstsolar.com>, 2010.

[2] F. Biccari, "CdTe solar cells", Technical report, 2011.

[3] N. Romeo, A. Bosio, A. Romeo, S. Mazzamuto and V. Canevari, "High efficiency CdTe/CdS thin film solar cells prepared by treating CdTe films with a Freon gas in substitution of CdCl<sub>2</sub>", 21st European Photovoltaic Solar Energy Conference, Dresden, Germany, 2006.

[4] X. Wu, J. C. Keane, R. G. Dhere, C. Dehart, et. al, "16.5% efficient CdS/CdTe poly-crystalline thin-film solar cell", Proc. 17th European Photovoltaic Solar Energy Conference, Munich, Germany, 2001.

*Acknowledgements:* This work has been supported by CONACYT-México under contract FORDECYT-116157. A. Rios-Flores acknowledges CONACYT-México for scholarship in the Applied Physics Department of CINVESTAV-IPN Unidad Mérida, also acknowledges to MRS by financial support received to participate in the Student Congress. The authors wish acknowledges Dr. Jose Mendez for UADY, for facilities extended to using the Oriel Simulator, Oswaldo Gómez, Wilian Cahuich, Oscar Ceh and Dora Huerta for technical support, and Lourdes Pinelo for secretarial assistance.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**MARTES 10**

CONFERENCIA 08

**Rayado de películas de CdTe por medio de un diodo láser**

D. Jiménez Olarte, G. Contreras-Puente, O. Vigil-Galán, A. Arce-Plaza

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

En este trabajo se presenta los resultados preliminares de la implementación de un sistema de escritura láser en películas de CdTe, depositadas por CSVT (Close Space Vapor Transport). Los elementos principales del sistema son: un diodo láser con una longitud de onda  $\lambda=438\text{nm}$  y una mesa XYZ cuya rapidez de desplazamiento puede ser regulable por medio de una computadora para mover las películas que serán rayadas. Se presenta un estudio de la profundidad, el ancho y la calidad de los rayados en función de la rapidez de desplazamiento de la mesa, parámetros esenciales en la tecnología de rayado aplicable a las celdas solares a películas delgadas. Los efectos del rayado láser en las distintas componente de una celda solar de CdS/CdTe mediante los conocidos pasos de rayado P1, P2 y P3 que consiste en un primer rayado en los contactos frontales, un segundo rayado en las películas de CdS y CdTe y un tercer rayado en los contactos posteriores para la interconexión de celdas en un módulo es el objetivo final de esta investigación.

Este trabajo es preliminar en el desarrollo de celdas solares del tipo TCO/CdS/CdTe.

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

MIÉRCOLES 11

CONFERENCIA 01

**La estabilidad del trímero de berilio, Be<sub>3</sub>: Un estudio *benchmark* CASSCF+ACPF**

A. Ramírez-Solís y J.I. Amaro-Estrada

Facultad de Ciencias, UAEM

A través de cálculos multirreferenciales AQCC (Averaged Quadratic Coupled Cluster) y utilizando un espacio activo de referencia SCF muy extenso (12 electrones activos en 13 y 14 orbitales), se obtuvieron las energías de enlace y las geometrías optimizadas de los isómeros lineal y triangular del trímero de berilio (Be<sub>3</sub>). La optimización fue realizada con la base cc-pV5Z; mientras que las energías de enlace (incluyendo corrección de counterpoise), calcularon con la base aug-cc-pV5Z. Las energías de enlace obtenidas (27.3 y 16.3 kcal/mol para los isómeros equilátero y lineal, respectivamente), son mayores comparadas con los valores anteriormente reportados a nivel de IC total, mientras que las distancias Be-Be de equilibrio 4.101 y 4.088 a.u. son menores. Debido a la consistencia de talla del método CASSCF+AQCC, a que se han correlacionado todos los electrones involucrados, al hecho de que el espacio activo completo incluye 14 orbitales y a la extensión de la base utilizada, proponemos que estos resultados sean considerados como datos de referencia para Be<sub>3</sub>. Utilizando la función de localización de pares de electrones (EPLF) al nivel CASSCF (12,15), se encontró que los orbitales 2p que están en el plano molecular juegan un papel muy importante en el patrón de enlace del isómero equilátero.



**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**MIÉRCOLES 11**

CONFERENCIA 02

**Tetrámero de oxígeno molecular ( $O_2$ )<sub>4</sub> : Fuerzas intermoleculares y la fase sólida épsilon**

M. Bartolomei, E. Carmona, M. Hernández, J. Pérez, J. Campos, IFF-CSIC, Madrid, España

Ramón Hernández L, CIQ, UAEMor, Cuernavaca, México

Recientemente ha sido determinada la estructura a presiones altas de la fase épsilon del oxígeno sólido, encontrándose unidades tetraméricas constituyendo a la red cristalina. Esto ha abierto un debate acerca de la naturaleza de las interacciones intermoleculares en agregados de oxígeno. En este trabajo hemos calculado por métodos ab initio las características del estado fundamental del tetrámero, mostrando que es un singlete compatible con el carácter no magnético de esta fase. A diferencia de otros trabajos relativos al tema que sugieren la importancia de enlaces de carácter químico, mostramos que las interacciones son de tipo van der Waals donde las interacciones de intercambio favorecen al estado singlete. Sin embargo al disminuir las distancias entre moléculas de oxígeno del tetrámero aparece una estabilización debida a efectos de muchos cuerpos que puede relacionarse con la formación incipiente de enlaces químicos. En base a esto hemos construido un modelo para predecir la estructura del sólido como función de la presión que esta en buen acuerdo con los valores experimentales.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**MIÉRCOLES 11**

CONFERENCIA 03

**Física Molecular y Resonancia Magnética Nuclear**

Carlos Amero  
Laboratorio de Bioquímica y Resonancia Magnética Nuclear  
Centro de Investigaciones Químicas  
Universidad Autónoma del Estado de Morelos

La Resonancia Magnética Nuclear (RMN) es una de las metodologías que más impacto ha tenido en los últimos años, como refleja el hecho de que 6 Premios Nobel, en distintas categorías, hayan sido otorgados al desarrollo directo de esta técnica: Física (Stern – 1943; Rabi – 1944; Bloch y Purcell – 1952), Química (Ernst – 1991; Wüthrich – 2002) y Medicina (Lauterbur y Mansfield – 2003).

La RMN se basa en el estudio de las pequeñas interacciones magnéticas entre los espines nucleares, sus alrededores y el campo magnético externo, brindándonos información molecular con resolución atómica. Junto con la difracción de rayos X, es la única metodología que puede usarse para determinar la estructura molecular de macromoléculas con alta resolución. Sin embargo, frente a la difracción de rayos X, la RMN presenta varias ventajas; una de ellas es que permite determinar la estructura molecular en solución. Además, permite estudiar de manera eficaz y sencilla las interacciones entre biomoléculas. Por último, la mayor ventaja de la RMN es la de ser la única metodología que permite el estudio de la dinámica de macromoléculas con resolución atómica en varias escalas de tiempos (ps, ns, ms, s, min). Dado que las biomoléculas no son entes estáticos, poder estudiar sus movimientos es indispensable para comprender su funcionamiento.

Debido a estas capacidades para monitorear los cambios estructurales, dinámicos y las distintas interacciones con resolución atómica, la RMN permite obtener información de distintos sistemas, difícilmente obtenida con otra metodología. En esta presentación se expondrá las bases generales del estudio de proteínas por RMN.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

**MIÉRCOLES 11**

CONFERENCIA 04

**Plegarse o agregarse, esa es la cuestión. La historia de JTO y WIL, dos proteínas muy similares con comportamientos muy diferentes.**

<sup>1</sup>Nina Pastor y <sup>2</sup>César Millán

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias, UAEM;

<sup>2</sup>División de Ciencias Biológicas y de la Salud, UAM-Iztapalapa

Las proteínas son heteropolímeros lineales, compuestos de veinte aminoácidos con propiedades físicas y químicas variadas. En agua, estas cadenas lineales se pliegan sobre sí mismas, escondiendo las regiones incompatibles con el agua en el interior de estructuras globulares. Hay muchas de éstas, pero hay una en particular que satisface simultáneamente las predilecciones de la gran mayoría de los monómeros que componen a la cadena; ésta es la estructura nativa. Compitiendo con este proceso de organización interna, hay otro de asociación intermolecular con el mismo fin: esconder del agua toda el área hidrofóbica posible. Para la mayoría de las proteínas, el proceso unimolecular (plegamiento) es más rápido y eficiente que el de agregación. Sin embargo, en ciertas condiciones patológicas gana el proceso de asociación, y se generan agregados que pueden ser amorfos u ordenados. Estos últimos se conocen como fibras amiloides, y tienen muy mala reputación por estar presentes en enfermedades neurodegenerativas como la de Alzheimer y de las vacas locas. De las amiloidosis que no afectan directamente al cerebro, la más común es la amiloidosis de cadena ligera, o AL. En ésta, las fibras se depositan en riñones, corazón, hígado, tracto digestivo y articulaciones, causando la eventual muerte del paciente. La cadena ligera es un fragmento de anticuerpo, producido en exceso por una célula blanca del sistema inmune que prolifera sin control.

En este trabajo analizamos dos proteínas derivadas de dos pacientes que producían muchas cadenas ligeras, JTO y WIL. El primero tenía mieloma múltiple, un tipo de cáncer del sistema inmune, pero nunca generó amiloidosis; el segundo tenía amiloidosis AL. Las proteínas de estos dos pacientes son muy parecidas entre sí en cuanto a su estructura (códigos 1CD0 y 2CD0 en el Protein Data Bank), y sin embargo difieren notablemente en estabilidad (WIL es 1.3 a 2 kcal/mol menos estable que JTO) y en la velocidad para formar fibras amiloides *in vitro* (WIL hace fibras más rápidamente y en mayor cantidad que JTO) [del Pozo Yauner *et al.* PROTEINS (2008) 72:684].

Para poder formar fibras amiloides, la proteína debe perder su estructura nativa, parcial o totalmente. Estas estructuras parcial o totalmente desnaturalizadas son efímeras, lo cual complica su caracterización experimental. Con simulaciones por dinámica molecular, realizadas en condiciones nativas y en condiciones desnaturalizantes, exploramos el espacio conformacional visitado por JTO y WIL. Encontramos diferencias locales en los contactos entre los aminoácidos, los cuales permiten mantener la estructura gruesa de la proteína (como se ve en los datos de cristalografía de rayos X) pero

modifican la dinámica de la proteína. Estos cambios en dinámica generan rutas de desplegamiento diferentes para JTO y WIL, reflejadas en la visita de distintos intermediarios de plegamiento. Usando un modelo modular de ensamble/desensamble de estas proteínas, encontramos que JTO y WIL pueblan intermediarios que podrían ser precursores de fibras, pero lo hacen con eficiencias diferentes.

Financiamiento: CONACYT 133294.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**MIÉRCOLES 11**

CONFERENCIA 05

**Dinámica de fragmentación de agregados de van der Waals**

Mario Hernández-Vera<sup>1</sup>, Olivia Borrel-Grueiro<sup>2</sup>, Maykel Márquez-Mijares<sup>1</sup>, Ernesto Quintas-Sánchez,  
Pedro Pajón-Suárez<sup>1</sup>, Ramón Hernández-Lamonedá<sup>3</sup>,

Jesús Rubayo-Soneira<sup>1</sup>.

1- Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas (InSTEC), Havana 10600, A.P. 6163, Cuba.

2- Facultad de Química, Universidad de la Habana. Habana 10400, La Habana, Cuba.

3- Centro de Investigaciones Químicas. Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Cuernavaca, Morelos, México.

La comprensión de la dinámica de complejos de van der Waals es de gran importancia para la físico-química de nuestros días. En los últimos años se han logrado grandes avances en el estudio de algunos de estos complejos debido a la obtención, mediante cálculos de primeros principios, de superficies de energía potencial que describen adecuadamente las interacciones. En el presente trabajo presentamos algunos resultados correspondientes a la dinámica de predisociación vibracional de complejos de van der Waals, tales como Ar-Br<sub>2</sub>(v) y NO-NO(v). Para el complejo ArBr<sub>2</sub>(v) se han realizado avances en la interpretación de importantes resultados experimentales acerca de la predisociación vibracional, desde el punto de vista cuántico. Este complejo ha sido estudiado experimentalmente, así como mediante la propagación de paquetes de onda, solucionando la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo [1]. En nuestro trabajo hemos aplicado el método cuasiclásico y hemos comparado nuestros resultados con los experimentales y teóricos, previamente empleados. Adicionalmente, hacemos una modificación al método de dinámica acelerada[2], con el cual el tiempo de propagación resulta sensiblemente menor. Igualmente, presentamos resultados preliminares sobre la dinámica cuasiclásica del complejo NO-NO, cuya superficie de energía potencial ha sido recientemente estudiada [3].

[1] THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS 127, 164309 \_2007\_

[2] J. Chem. Theory Comput. 2006, 2, 912-919

[3] J. Phys. Chem. A 2011, 115, 2892–2899

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

**MIÉRCOLES 11**

CONFERENCIA 06

**Estudio de las propiedades ópticas de espejos omnidireccionales de silicio poroso para aplicaciones como reflectores laser**

J. O. Estevez<sup>1</sup>, K. Pérez<sup>1</sup>, J. Arriaga<sup>1</sup>, A. Méndez Blas<sup>1</sup>, D. Mayorga<sup>2</sup>, V. Agarwal<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48,*

*C.P. 72570, Cd. Puebla, México.*

<sup>2</sup>*CIICAP, Universidad Autónoma del Estado de Morelos,*

*C.P. 62209, Cuernavaca Mor., México*

[jestvez@sirio.ifuap.buap.mx](mailto:jestvez@sirio.ifuap.buap.mx)

Los cristales fotónicos (CF) son estructuras de multicapas donde existe una variación periódica en el índice de refracción y presentan una banda prohibida fotónica (BPF) [1]. Para determinados contrastes entre los índices de refracción, el sistema periódico exhibe una banda prohibida fotónica (BPF) omnidireccional, esto es, cuando una onda electromagnética incide sobre el CF con una frecuencia dentro del rango de frecuencias de la BPF omnidireccional, toda la radiación será reflejada independientemente de la polarización y ángulo de incidencia [2]. Recientemente estas estructuras omnidireccionales se han fabricado con silicio poroso (SP) debido a su baja absorción y dispersión en la región visible e infrarroja, en comparación con los espejos metálicos simples. Las estructuras de multicapas de SP son obtenidas por anodización electroquímica. En este trabajo se estudia la reflectancia especular en espejos omnidireccionales basados en silicio poroso (SP) cuando se les degrada mediante luz laser; se cuantifican los posibles efectos de la intensidad del laser, el ángulo de incidencia de la luz laser, el rango de omnidireccionalidad, etc. También, para evaluar la influencia de considerar interfases suaves entre las capas adyacentes, se consideraron dos estructuras diferentes, donde el índice de refracción varía de acuerdo a la envolvente de una función Gaussiana [2]. La cuantificación de la degradación como función de la intensidad del laser y el ángulo de incidencia de la luz es de vital importancia cuando se desean aplicar las estructuras fotónicas de SP como espejos para laser [3] o espejos secundarios para concentradores solares [4].

[1] J. D. Joannopoulos, R. D. Meade, and J. N. Winn, "Photonic Crystals: Molding the flow of light", Princeton University Press, 1995.

[2] J. O. Estevez, J. Arriaga, A. Méndez Blas and V. Agarwal, Appl. Phys. Lett., **93**, 191915 (2008).

[3] W. H. Zheng, P. Reece, B. Q. Sun, and M. Gal, Appl. Phys. Lett., **84**, 3519 (2004).

[4] M.B. de la Mora, O.A. Jaramillo, R. Nava, J. Tagüeña-Martínez, J.A. del Río, Solar Energy Materials & Solar Cells, (2009).

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

**MIÉRCOLES 11**

CONFERENCIA 07

**Espejos dieléctricos omnidireccionales en la región visible**

A. David Ariza-Flores<sup>1</sup>, L.M. Gaggero-Sager<sup>1</sup>, and V. Agarwal<sup>2</sup>

1: Facultad de Ciencias, UAEM, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, Cuernavaca, Morelos 62210, Mexico. 2: CIICAp, UAEM, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, Cuernavaca, Morelos 62210, Mexico.

Correo electrónico: [david1cool@gmail.com](mailto:david1cool@gmail.com)

Los espejos dieléctricos multicapas han sido objeto de estudio en los últimos años debido a que presentan propiedades ópticas fácilmente modulables [1]. Cuando la luz incide de forma perpendicular sobre la estructura multicapa, el espectro de reflectancia se presenta como una banda fotónica prohibida en espejos periódicos. Sin embargo, cuando la luz no incidente de forma perpendicular, el espectro correspondiente a la parte polarizada tipo p presenta un corrimiento hacia el azul, así como un decremento de la banda prohibida [2]. Debido a este fenómeno, el efecto de incidir la luz para distintos ángulos en espejos dieléctricos, es un espectro que "cambia de color con el ángulo". Algunos esfuerzos para evitar este corrimiento han sido la fabricación de espejos con una banda prohibida muy grande, de tal manera que al varía el ángulo de incidencia, el corrimiento y decremento de la banda no afecte la región deseada y se mantenga siempre una reflectancia cercana al 100 % [3]. Tales espejos son llamados omnidireccionales. Diversos autores han fabricado estos espejos con silicio poroso (PS) en regiones que cubren parte del infrarrojo cercano [4,5]. Sin embargo, uno de los grandes retos es la fabricación de espejos dieléctricos omnidireccionales en la región visible con PS. El último reporte sobre espejos omnidireccionales en el visible fue realizado por Deopura *et al.* en el año 2001 [6], sin embargo, solamente cubría una pequeña región del espectro visible. Los principales problemas para obtener dichos reflectores son la absorción de luz del silicio (Si) en la región del azul, el diminuto espesor físico requerido de cada capa y el gran espesor físico total de la estructura, entre otros. En este trabajo se presentan algunas estrategias para la fabricación de espejos omnidireccionales de PS en la región visible, contemplando la dispersión y absorción del Si, así como la modulación del perfil de porosidades que permiten obtener el reflector de mayor banda fotónica.

[1] Ghulinyan M, Oton C J, Bonetti G, Gaburro Z, and Pavesi L 2003 J. Appl. Phys. **93** 9724.

[2] Ariza-Flores D, Gaggero-Sager LM, and Agarwal V 2012 J. Phys. D: Appl. Phys. **45** 015102.

[3] Xifré-Pérez E, Marsal LF, Ferré-Borrull J, and Pallarés J 2009 Appl Phys B **95** 169.

[4] Bruyant A, Léron del G, Reece P J, and Gal M 2003 Appl. Phys. Lett. **82** 3227.

[5] Estevez J O, Arriaga J, Méndez Blas A, and Agarwal V 2009 Appl. Phys. Lett. **94** 061914.

[6] Deopura M, Ullal C K, Temelkuran B, and Fink Y 2001 Opt. Lett. **26** 1197.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**MIÉRCOLES 11**

CONFERENCIA 08

**Optical phonons in core/shell nanowires: strain effects**

Darío G. Santiago-Pérez<sup>1,2</sup>, C. Trallero-Giner<sup>3,4</sup>, R. Pérez-Álvarez<sup>2</sup>, L. Chico<sup>5</sup>, R. Baquero<sup>6</sup>, G. E. Marques<sup>4</sup>

1: Permanent address: Universidad "José Martí Pérez" de Sancti Spiritus, Ave. de los Mártires 360, CP 62100, Sancti Spiritus, Cuba.

2: Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

3: Department of Theoretical Physics, Havana University, Havana 10400, Cuba.

4: Departamento de Física, Universidade Federal de São Carlos, 13565-905, São Carlos, SP, Brazil.

5: Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC, Cantoblanco, 28049 Madrid, Spain.

6: Departamento de Física, CINVESTAV, Apartado Postal 14-740, 07000 México, Distrito Federal, México.

A detailed analysis of the uncoupled polar optical-phonon modes with cylindrical symmetry ( $n=0$ ) and translational invariance along the wire ( $k_z=0$ ) in core/shell semiconductor nanowires with circular cross section is presented, within the framework of a phenomenological continuum model. The effects of strain on confined longitudinal optical (LO) and transverse optical (TO) core-like and shell-like phonon modes in GaAs/GaP quantum wire are considered. The reported TO splitting together with LO confined modes may be used as a way to extract information on the core and shell nanostructures, by comparison to Raman and infrared spectroscopy techniques. Employing recently reported experimental results on GaAsP/GaP core-shell nanowires, the ratio of the LO and TO Grüneisen mode parameters is determined.



**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

**MIÉRCOLES 11**

CONFERENCIA 09

**Tiempo de tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor**

D. Villegas<sup>1</sup>, F. de León Pérez<sup>2</sup> y R. Pérez Álvarez<sup>3</sup>

1-Departamento de Física, Universidad Central "Marta Abreu" de Las Villas, Santa Clara, Villa Clara, Cuba.

2-Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA) & Departamento de Física de la Materia Condensada, Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza Zaragoza, España.

3-Facultad de Ciencias, UAEM, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

En este trabajo se estudia el tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor. A partir de la ecuación de continuidad de la densidad de energía del sistema se obtiene un tiempo característico análogo al tiempo de estancia para electrones; así como una relación analítica general entre el tiempo de estancia y los diferentes tiempos de transmisión y reflexión. Se investiga un fenómeno análogo al efecto Hartman durante el tunelaje de fonones de longitud de onda larga y se propone una posible explicación del mismo sobre la base de la saturación de la energía vibracional almacenada en la región de la barrera. En particular se realiza un estudio del tunelaje resonante en un sistema de doble barrera de fonones, lo cual permite estudiar el denominado efecto Hartman generalizado. Además se introduce el concepto de impedancia generalizada y su posible aplicación en el cálculo de las amplitudes de las ondas en las diferentes regiones que conforman a una estructura arbitraria.

Referencias

1-E. H. Hauge, J. P. Falck, y T. A. Fjeldly, "Transmission and reflection times for scattering of wave packets off tunneling barriers", Phys. Rev. B, 36, 4203 (1987).

2-S. Mizuno y S. Tamura, Theory of acoustic-phonon transmission in finite-size superlattice systems, Phys. Rev. B 45, 734 (1992). S. Mizuno y S. Tamura, Transmission and reflection times of phonon packets propagating through superlattices, Phys. Rev. B 50, 7708 (1994).

3-D. Villegas, F. León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, "Tunneling time of long-wavelength phonons through semiconductor heterostructures," Phys. Rev. B. 71, 035322, (2005). D. Villegas, F. León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, "Tunneling time of phonons: dependence on the systems's size," Physica Status Solidi (b). 242, 1767, (2005). D. Villegas, F. León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, "Gaussian superlattice for phonons," Microelectronics Journal. 36, 411, (2005). D. Villegas, F. León-Pérez, and R. Pérez-Álvarez, "Longwave phonon tunnelling using an impedance concept," PIERS on line. 4, 227, (2008)

4-D. Villegas, "Tiempo de tunelaje de fonones a través de una heteroestructura semiconductor", Tesis de doctorado, (2011).

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

JUEVES 12  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)

CONFERENCIA 01

**Procesos avanzados de oxidación aplicados al tratamiento de aguas**

Rubén César Vásquez Medrano

Departamento de Ingeniería y Ciencias Químicas, Universidad Iberoamericana. Email:

[ruben.vasquez@uia.mx](mailto:ruben.vasquez@uia.mx)

Los procesos avanzados de oxidación (PAOs) pueden usarse para degradar compuestos orgánicos bio-recalcitrantes que se encuentran en aguas contaminadas. Los PAOs generan especies transitorias *in situ* sumamente reactivas ( $H_2O_2$ ,  $OH^\cdot$ ,  $O_2^{\cdot-}$ ), las cuales pueden oxidar diferentes especies orgánicas. Los PAOs se pueden efectuar en medios homogéneos o heterogéneos. Dentro de los PAOs se encuentran los procesos de foto-Fenton y electro-Fenton. En ambos casos, se utilizan iones de hierro como catalizador y  $H_2O_2$  como oxidante. En este trabajo se presentan los resultados de los tratamientos que se realizaron a un lixiviado maduro de relleno sanitario, así como de aguas residuales contaminadas con azul índigo, usando el proceso foto-Fenton. Asimismo, se presentan los resultados preliminares de la generación *in situ* de peróxido de hidrógeno sobre un electrodo de diamante dopado con boro, utilizando el proceso de electro-Fenton. En los tres casos, los resultados son muy alentadores para escalar los procesos a nivel industrial.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**JUEVES 12  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)**

CONFERENCIA 02

**Membranas inteligentes de porosidad controlada por variación en la temperatura y el pH**

R.F. Estrada, E. Sánchez-Aguilera.

Universidad Iberoamericana, Departamento de Física y Matemáticas, Prol. Paseo de la reforma 880,  
Lomas de Santa fe 01219, Alvaro Obregón México D.F. Email: [rodolfo.estrada@uia.mx](mailto:rodolfo.estrada@uia.mx)

En este trabajo se presenta una investigación hecha sobre el control de la porosidad en membranas sintetizadas a partir de acetato de celulosa modificadas con ácido poliacrílico. Las membranas se hacen disolviendo acetato de celulosa en ácido acético glacial, la solución se vacía en moldes de plástico de 10 cm de diámetro, el molde con la solución se coloca sobre una mezcla de agua con hielo durante 3 minutos para dejarla reposar y enfriar, el molde con todo y la solución ya fría se sumergen en el agua a una temperatura de 4°C hasta que la membrana se forma. Una vez que se obtiene la membrana se le da un tratamiento con agua caliente manteniendo constante la temperatura a 60°C y variando el tiempo de tratamiento térmico en intervalos de 30 segundos hasta alcanzar 5 minutos, posteriormente se les da un tratamiento en una solución de pH controlado. Las membranas se caracterizaron por microscopía electrónica de barrido de bajo vacío con el equipo Jeol L.V 5600. Los resultados muestran que empleando esta técnica el tamaño de poro se puede controlar obteniendo una variación de la porosidad que va desde 0.8 hasta 22.3 micras de diámetro. Otro resultado importante es que se puede obtener un material poroso que tiene una estructura muy similar a la de un hueso.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**JUEVES 12  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)**

CONFERENCIA 03

**La Búsqueda del Bosón de Higgs: desde sus inicios hasta los últimos resultados: Un enfoque experimental**

Dr. Salvador Carrillo Moreno

Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana. Email:  
[salvador.carrillo@uia.mx](mailto:salvador.carrillo@uia.mx)

Se realizará una presentación básica del Modelo Estándar de Partículas Elementales poniendo énfasis en la necesidad de introducirlo como mecanismo del origen de la masa por Peter Higgs en 1964, pasando principalmente por las búsquedas experimentales del LEP, Tevatrón y actualmente del LHC.

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

JUEVES 12  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)

CONFERENCIA 04

**Síntesis y Propiedades de Transporte de Gases en Membranas basadas en Polímeros Orgánicos e Híbridos**

Dr. Alberto Ruiz Treviño

Departamento de Ingenierías, Universidad Iberoamericana. Prol. Paseo de la Reforma No. 880, México

D. F. 01210. Teléfono (52) 55 5950 - 4000 extensión 7752; [alberto.ruiz@uia.mx](mailto:alberto.ruiz@uia.mx)

El desarrollo e implementación de tecnología sustentable o tecnología limpia es inminente en un mundo en donde el efecto de invernadero produce graves cambios climáticos. La tecnología de separación de gases y/o líquidos utilizando membranas poliméricas es muy atractiva debido al mínimo consumo de energía involucrado en su operación. Sin embargo, para su uso generalizado en ambientes hostiles como la petroquímica e industria química, se requieren polímeros más robustos en términos de propiedades mecánicas y térmicas.

En esta plática se hace una descripción de procesos en donde esta tecnología encuentra sus aplicaciones potenciales y describirá los esfuerzos que la Universidad Iberoamericana sigue para obtener polímeros orgánicos e híbridos con propiedades sobresalientes en términos mecánicos, térmicos y, desde luego, en términos de los coeficientes de permeabilidad,  $P(i)$ , asociados con la productividad y de la selectividad de un gas que interesa con respecto a otro  $\alpha(i/j)$ , asociado con la calidad de la separación.

Específicamente, se presentará la síntesis y evaluación de los coeficientes de permeabilidad de gases como  $H_2$ ,  $O_2$ ,  $N_2$ ,  $CH_4$ , y  $CO_2$  en polímeros orgánicos basados en polisulfonas y poliarilatos de alto volumen libre, así como también en polímeros híbridos basados en poliestirenos que contienen en sus extremos pequeñas nanopartículas poliédricas de silsesquioxanos (POSS). Pequeñas cargas de POSS en la síntesis de poliestireno lleva a producir membranas más permeables con pequeñas reducciones en la selectividad hacia pares de gases.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

**JUEVES 12  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)**

CONFERENCIA 05

**Análisis de procesos de dispersión de fotones por modos acústicos en fluidos relativistas: Primeras simulaciones numéricas**

Mtra. Dominique Brun Battistini

Universidad Iberoamericana

[dominique.brun@uia.mx](mailto:dominique.brun@uia.mx)

Se muestran los primeros resultados numéricos correspondientes al establecimiento del espectro Rayleigh-Brillouin asociado a la interacción de fotones con los modos acústicos de un fluido relativista. Este tipo de análisis reviste un gran interés debido a que actualmente no existe un consenso referente a la forma correcta de describir acoplamientos entre flujos y fuerzas termodinámicas para fluidos de muy altas temperaturas. Los resultados permiten identificar las características sobresalientes de cada alternativa propuesta en la literatura.

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

JUEVES 12  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)

CONFERENCIA 06

**A review a set of results concerning Thomas-Fermi like universalities in the energy spectra of semiconductor quantum dots and atomic ions**

Augusto Gonzalez  
Institute of Cybernetics, Mathematics and Physics, Havana  
[agonzale@icmf.inf.cu](mailto:agonzale@icmf.inf.cu)

I review a set of results concerning Thomas-Fermi like universalities in the energy spectra of semiconductor quantum dots and atomic ions. Universal relations are tested against numerical (CISD) calculations and experimental values.

[1] Universality in the energy spectrum of medium-sized quantum dots, Alexander Odriazola, Alain Delgado and Augusto Gonzalez, Phys. Rev. B **78** (2008) 205320.

[2] Thomas-Fermi scaling in the energy spectra of atomic ions, R. Carcasses and A. Gonzalez, Phys. Rev. A. **80**, 024502 (2009).

[3] On the correlation energy of semiconductor quantum dots, A. Odriazola, A. Delgado and A. Gonzalez, to be submitted.





## **CARTELES**



**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 01

**Las ecuaciones de Eliashberg y McMillan obtenidas del modelo Riera- Marín para la interacción par de electrones-fonón**

Carlos Figueroa N.<sup>a</sup> Re. Betancourt Riera<sup>b,c</sup>, R. Riera<sup>b</sup> y Ri. Betancourt Riera<sup>c</sup>

*a)Departamento de Ing. Industrial, Universidad de Sonora. Apdo. Postal 1626, C.P. 83000, Hermosillo, Sonora, México*

*b)Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora. Apdo. Postal 5-088, C.P. 83190, Hermosillo, Sonora, México.*

*c)Instituto Tecnológico de Hermosillo. Avenida Tecnológico S/N, Col. Sahuaro, C.P. 83170, Hermosillo, Sonora, México.*

En este trabajo tratamos la superconductividad convencional a través del modelo Riera-Marín para el par de electrones interactuando con la red fonónica. El mecanismo de apareamiento de electrones considera el potencial coulombiano y el intercambio de fonones según la figura 1 donde los electrones etiquetados como 1 y 2 cambian de momento  $k$  debido a la interacción con un fonón de momento  $q$  con la energía de Fermi ubicada en el centro de la brecha.

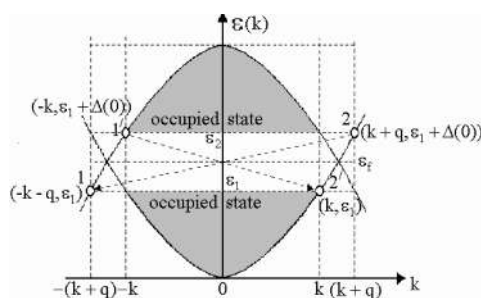


Fig. 1 La disposición las bandas electrónicas para la formación de los pares al alcanzarse la temperatura crítica; y cómo el rompimiento de la simetría produce un gap para los electrones y una zona permitida para los pares centrada en el nivel de Fermi.

El modelo expresa los operadores de Bose como una combinación lineal de operadores de Fermi. Con esta idea es posible obtener la ley de dispersión, la expresión del gap a 0 K. Asimismo con este esquema se obtiene un hamiltoniano semejante al de la teoría BCS. Este resultado y con la teoría del Campo Autoconsistente se utilizan para calcular la ecuación de la temperatura crítica, importante resultado reportado por G.M. Eliashberg y W.L. McMillan. La energía del par es calculada y se discute una interpretación. La expresión para la variación del gap es deducida como una función de la temperatura y es evaluada para el superconductor,  $MgB_2$ , luego es comparado contra otros resultados teóricos y experimentales.

El propósito fundamental de nuestra contribución es plantear de manera diferente la superconductividad. Los desarrollos teóricos tienen como esencial la teoría BCS, la cuál marca el destino de muchas explicaciones del fenómeno. En ese sentido, después que la BCS fuera establecida,

muchos trabajos se orientaron a realizar correcciones a los modelos para obtener la temperatura crítica. Para ello se usó técnicas de muchos cuerpos y funciones de Green; enfocadas a determinar el espectro de energía. Sin embargo no hay trabajos dedicados a calcular otras magnitudes físicas basadas en la ley de dispersión, la cuál tiene diferentes puntos de vista, a los reportados en la literatura.

#### Referencias

Bose Operators as linear combination of Fermi operators. Correlated electron pair formation. J. Comput. Theor. Nanosci., Vol. 5, No. 7 1546-1955 (2008).

The McMillan-Eliashberg equation obtained with Consistent Self Theory. J. Comput. Theor. Nanosci., Vol. 6, No. 7, Vol.6, 1546-1955 (2009).

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

POSTER 02

**The electrical conductivity behavior of nanostructured BaTiO<sub>3</sub>-CoFe<sub>2</sub>O<sub>4</sub> composites**

R. López-Noda<sup>1</sup>, U. Acevedo<sup>2</sup>, F. Calderón-Piñar<sup>3</sup>, S. Ammar<sup>4</sup> and R. Valenzuela<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física Aplicada, Instituto de Cibernética, Matemática y Física, ICIMAF, CITMA. 15 # 551, Vedado. La Habana 10400, Cuba*

<sup>2</sup>*Departamento de Materiales Metálicos y Cerámicos del Instituto de Investigaciones en Materiales de la Universidad Autónoma de México (UNAM). DF. 04510 Mexico*

<sup>3</sup>*Facultad de Física-Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana. San Lázaro y L, Vedado. La Habana 10400, Cuba.*

<sup>4</sup>*ITODYS, UMR-CNRS 7086, Université de Paris 7-Diderot, 75205 Paris, France*

Multiferroic materials have attracted much attention due to the possibility of exchanging electrical signals by magnetic signals and viceversa<sup>1</sup>. This paper presents an analysis of the electrical conductivity of a nanostructured mixture composed of ferroelectric nanoparticles (NPs) (barium titanate) and ferrimagnetic NPs (cobalt ferrite). NPs were first obtained separately by *chimie douce*, by forced hydrolysis in a polyol<sup>2</sup> (with diameters in the 5-8 nm range), mixed, and then consolidated to densities about 90% of the theoretical value by spark plasma sintering (SPS<sup>3</sup>), with a final grain size in the 50 nm range. Gold electrodes were deposited on the opposite surfaces of samples. All the characterization data can be found elsewhere<sup>4</sup>. The universal relaxation law<sup>5</sup> is used to study the electrical conductivity results in a wide frequency and temperature ranges. The activation energy values of the thermal hopping and the dc conductivity processes are calculated from the Arrhenius dependence. Clear evidence of the magnetoelectric coupling between the two phases is observed.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 03

**Dispersión Raman Electrónica en un Pozo Cuántico Múltiple Asimétrico con la presencia de un campo Eléctrico Externo.**

Ricardo Betancourt Riera<sup>a</sup>, René Betancourt Riera<sup>a,b</sup>, Raúl Riera Aroche<sup>b</sup>, y Rodrigo Arturo Rosas Burgos<sup>c</sup>

a) *Instituto Tecnológico de Hermosillo. Avenida Tecnológico S/N, Col. Sahuaro, C.P. 83170, Hermosillo, Sonora, México.*

b) *Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora. Apdo. Postal 5-088, C.P. 83190, Hermosillo, Sonora, México.*

c) *Departamento de Física, Universidad de Sonora. Apdo. Postal 1626, C.P. 83000, Hermosillo, Sonora, México.*

El desarrollo de las técnicas de fabricación nanométricas ha permitido la obtención de nanoestructuras de varios tipos como los pozos cuánticos múltiples asimétricos, hilos cuánticos y otras. En el caso de los pozos cuánticos múltiples, se están utilizando para la obtención de fuentes eficientes y coherentes de radiación infrarroja. Estos dispositivos pueden ser fabricados mediante crecimiento epitaxial en una matriz  $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ , también pueden utilizarse otros materiales ternarios y cuaternarios. Las principales aplicaciones de estos sistemas nanoestructurados son, entre otras, en la tecnología de las comunicaciones, radares, la optoelectrónica, etcetera. Por ejemplo, un láser Raman puede ser construido a partir de un sistema de tres o cuatro niveles de energía, de tal manera que la separación requerida entre los niveles de energía se puede obtener mediante el uso de pozos cuánticos asimétricos doble y triple.

En trabajos anteriores se ha estudiado la dispersión Raman considerando o no los efectos de la transición intersubbanda debido a la interacción electrón-fonón, sin tomar en cuenta la presencia de un campo eléctrico externo. De cualquier manera, la mayoría de las propiedades físicas que se presentan en las nanoestructuras están implícitamente contenidas en la función de onda por lo que cualquier cambio, debido al confinamiento espacial o a la presencia de un campo eléctrico o magnético, produce un cambio en la función de onda que se corresponde con un cambio en las propiedades físicas del sistema. Esto nos ha motivado para analizar la dispersión Raman electrónica en pozos cuánticos múltiples asimétricos considerando el efecto del campo eléctrico. En nuestro modelo, dado que la banda de conducción está parcialmente llena, el electrón experimenta una transición entre dos subbandas al absorber un fotón, para luego emitir un fotón de radiación secundaria, realizando una nueva transición.

En este trabajo hemos podido determinar la estructura de bandas y la sección eficaz de dispersión Raman para un pozo cuántico múltiple asimétrico con la presencia de un campo eléctrico externo. Nuestros resultados proporcionan una comprensión transparente de la estructura de sub-bandas, de los espectros Raman y así como del efecto del campo eléctrico en estos. Los resultados aquí presentados nos permiten comparar con resultados experimentales anteriores. Además, nos muestran que cualquier cambio en la configuración del sistema conduce a cambios en la intensidad y la frecuencia de la radiación secundaria.

## Referencias

A. J. Ghazai, S. M. Thahab, H. Abu Hassa Y Z. Hassan, *Sci China Tech Sci*, **54** (2011) 47

G. Scalari, M. I. Amanti, C. Walther, R. Terazzi, M. Beck, J. Faist, *Optics Express*, **18** (2010) 8043

Christoph Deutsch, Alexander Benz, Hermann Detz, Pavel Klang, Michele Nobile, Aaron Maxwell Andrews, Werner Schrenk, Tillmann Kubis, Peter Vogl, Gottfried Strasser, and Karl Unterrainer, *Appl. Phys. Lett.* **97** (2010) 261110

G. Sun, R. A. Soref, and H. H. Cheng, *J. Appl. Phys.* **108** (2010), 033107

Asaf Albo, Gad Bahir and Dan Fekete, *J. Appl. Phys.* **108** (2010) 093116.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 04

**Dispersión Raman Electrónica en un Pozo Cuántico Múltiple Asimétrico con la presencia de un campo Eléctrico Externo: Interacción de Frölich.**

Ricardo Betancourt Riera<sup>a</sup>, René Betancourt Riera<sup>a,b</sup>, Raúl Riera Aroche<sup>b</sup>, y Rodrigo Arturo Rosas Burgos<sup>c</sup>

a) *Instituto Tecnológico de Hermosillo. Avenida Tecnológico S/N, Col. Sahuaro, C.P. 83170, Hermosillo, Sonora, México.*

b) *Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora. Apdo. Postal 5-088, C.P. 83190, Hermosillo, Sonora, México.*

c) *Departamento de Física, Universidad de Sonora. Apdo. Postal 1626, C.P. 83000, Hermosillo, Sonora, México.*

La espectroscopia Raman es una técnica útil para estudiar la estructura electrónica de las nanoestructuras. El análisis de la sección transversal diferencial de un proceso de dispersión Raman nos permite determinar la estructura de sub-bandas de los sistemas nanoestructurados mediante una inspección directa de las posiciones de las singularidades en el espectro, teniendo en cuenta las reglas de selección de las transiciones del electrón, las distintas interacciones y las diferentes polarizaciones de la luz incidente o emitida.

Existe un gran interés en fabricar fuentes de luz coherente en el infrarrojo medio. Estos dispositivos se pueden fabricar, por ejemplo, de una matriz  $GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ , así también pueden utilizarse otros materiales ternarios y cuaternarios. El período activo se compone de dos o tres pozos asimétricos de  $GaAs$  separados por una barrera de  $Al_{0.35}Ga_{0.65}As$ . Básicamente, para el diseño de este dispositivo se requiere la presencia de un campo eléctrico externo el cual produce un cambio en las propiedades físicas del sistema. Esto nos ha motivado para analizar la dispersión Raman electrónica en pozos cuánticos múltiples asimétricos considerando el efecto del campo eléctrico. Para ello se ha seleccionado un modelo en el que el electrón en la banda de conducción experimenta una transición inter-subbanda al absorber un fotón, después el electrón emite un fotón de radiación secundaria al realizar una nueva transición inter-subbanda. Finalmente, en el tercer paso, se ha considerado el efecto de fonones, asumiendo la emisión de un fonón por el electrón, el cual experimenta una transición que lo lleva al estado inicial.

De esta manera presentaremos un formalismo para el cálculo y estudio de la estructura de bandas y la sección eficaz de dispersión Raman para un pozo cuántico múltiple asimétrico con la presencia de un campo eléctrico externo teniendo en cuenta la interacción electrón-fonón. Los resultados presentados en este trabajo son similares a los obtenidos previamente en algunos trabajos experimentales. En el presente trabajo se ha utilizado un modelo continuo de los fonones ópticos, que satisface las condiciones de frontera, tanto electrostáticas como mecánicas en la interfaz de acuerdo con los principios físicos. Demostramos que la presencia de un campo eléctrico rompe la simetría, cambiando las reglas de selección de las transiciones electrónicas y alterando el acoplamiento entre los pozos.

Referencias



A. J. Ghazai, S. M. Thahab, H. Abu Hassa Y Z. Hassan, *Sci China Tech Sci*, **54** (2011) 47

G. Scalari, M. I. Amanti, C. Walther, R. Terazzi, M. Beck, J. Faist, *Optics Express*, **18** (2010) 8043

Christoph Deutsch, Alexander Benz, Hermann Detz, Pavel Klang, Michele Nobile, Aaron Maxwell Andrews, Werner Schrenk, Tillmann Kubis, Peter Vogl, Gottfried Strasser, and Karl Unterrainer, *Appl. Phys. Lett.* **97** (2010) 261110

G. Sun, R. A. Soref, and H. H. Cheng, *J. Appl. Phys.* **108** (2010), 033107

Asaf Albo, Gad Bahir and Dan Fekete, *J. Appl. Phys.* **108** (2010) 093116.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 05

**Estudio teórico de la transmisión de electrones para una superred finita con una modulación lineal en las alturas de las barreras en GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As**

K.A. Rodríguez-Magdaleno, J.C. Martínez-Orozco, D.A. Contreras-Solorio.

Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas. Calzada Solidaridad esquina con Paseo a La Bufa S/N. C.P. 98060. Zacatecas. Zac. México. Email: [karelyrod@fisica.uaz.edu.mx](mailto:karelyrod@fisica.uaz.edu.mx)

Es bien conocido que la propagación de electrones, ondas acústicas o electromagnéticas en sistemas multicapas es un tema muy importante por sus múltiples aplicaciones prácticas, esencialmente como filtros. En este trabajo presentamos resultados teóricos de la transmisión de electrones (Transmitancia) en un sistema multicapas de pozos y barreras de GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As en una superred finita donde la altura de las barreras de potencial sigue un perfil lineal hasta un valor máximo determinado por una concentración de aluminio  $x$  dentro del régimen de gap directo ( $x < 0.45$ ) para la mezcla ternaria Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As, posteriormente se disminuye la concentración de la misma manera hasta el valor mínimo inicial produciendo un perfil de potencial como una  $V$  invertida. Se presentan resultados de la transmitancia para diferentes valores de los anchos de las barreras  $w_b$  y de los pozos  $w_w$  así como para diferentes números de pozos y barreras. El espectro de energías para este tipo de estructuras consiste de minibandas permitidas (passbands) separadas por brechas prohibidas de energía (stopbands). La idea detrás del estudio de este tipo de estructuras es que la reducción de las alturas de las barreras desde el centro hacia los extremos de la superred finita causa que la vida media de los eigenestados energéticos disminuye debido a que los electrones penetran más fácilmente y por el principio de incertidumbre el ancho de la banda de las correspondientes curvas de resonancia incrementa y dado que las minibandas permitidas (passbands) de la estructura son las envolventes de las curvas de resonancia entonces este tipo de perfiles de potencial mejora la transmisión de las bandas permitidas (passbands). Este estudio teórico de transmitancia se hace mediante el método de la matriz de transferencia usando la ecuación de Ben Daniel Duke dentro de la aproximación de masa efectiva, considerando la dependencia del valor de la masa efectiva con la concentración en la aproximación de cristal virtual.

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

POSTER 06

**Cálculo de la estructura electrónica de un Transistor Efecto de Campo delta-dopado dentro en la aproximación de enlace fuerte (*tight-binding*)**

J.G. Rojas-Briseño, J.C. Martínez-Orozco

Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas. Calzada Solidaridad esquina con Paseo a La Bufa S/N. C.P. 98060. Zacatecas. Zac. México}. Email: [jgrojas@fisica.uaz.edu.mx](mailto:jgrojas@fisica.uaz.edu.mx)

Presentamos los resultados del cálculo en la aproximación de enlace fuerte (*tight-binding*) de la estructura de niveles de un Transistor Efecto de Campo delta-dopado (delta-FET) en una matriz de Arseniuro de Galio (GaAs) dentro del modelo semi-empírico de enlace fuerte  $sp^3s^*$  a primeros vecinos considerando el espín. Usamos expresiones analíticas autoconsistentes para el potencial del pozo delta-dopado y se considera como potencial externo, de manera tal que estas expresiones son incluidas en los términos de la diagonal principal del Hamiltoniano *tight-binding*. De esta manera tenemos la posibilidad de estudiar el comportamiento de los niveles de energía variando los parámetros claves del sistema. En esta ocasión variamos la densidad bidimensional de impurezas del pozo delta-dopado  $N_{2d}$  dentro del rango de  $4.0 \times 10^{12}$  -  $9.0 \times 10^{12}$   $\text{cm}^{-2}$  así como la altura de la barrera y comparamos nuestros resultados con los que se obtiene de la aproximación de masa efectiva para verificar dentro de que rango es aplicable la aproximación de enlace fuerte.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 07

**Transmitancia Acústica de un Sistema Multicapas con Modulación Lineal de las Impedancias**

J. J. Rodríguez Pérez<sup>1</sup>, R. A. Reyes Villagrana<sup>2</sup>, D. A. Contreras Solorio<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Universidad Autónoma de Zacatecas Unidad Académica de Física

<sup>2</sup> Universidad de Guanajuato, Departamento de Ingeniería Física

[dacs10@yahoo.com.mx](mailto:dacs10@yahoo.com.mx)

Estudiamos teóricamente la transmitancia acústica de un sistema multicapas en el cual se alternan capas de agua con capas de material con impedancias acústicas características variables, las cuales tienen una variación lineal. El valor de las impedancias de las capas disminuye del centro hacia los lados de la estructura, mientras los grosores de las capas de agua y las de impedancia variable son constantes. El espectro de transmisión consiste de pasabandas separadas por gaps donde no hay transmisión (stopbands). La idea de estudiar este tipo de estructura es que la variación lineal suave de los valores de las impedancias facilita la transmisión, ocasionando que ésta sea mejor en las pasabandas. Este tipo de estudios puede tener aplicaciones en el diseño de filtros acústicos. Comparamos la transmisión de este tipo de estructura con el de un sistema en el que todas las capas que no son de agua, tienen el mismo valor de impedancia. En los cálculos usamos el método de matriz de transferencia construida en base a matrices de dispersión en las interfaces y de propagación dentro de cada capa.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 08

**Potencial para formar fibras amiloides de fragmentos de anticuerpos de humanos**

Jessica Araujo, Darely Gutiérrez, Liliana Martínez, Diana Valenzo y Nina Pastor

Facultad de Ciencias, UAEM Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos  
[nina@uaem.mx](mailto:nina@uaem.mx)

La amiloidosis de cadena ligera (AL) es una enfermedad caracterizada por la deposición de fibras compuestas principalmente del dominio variable de las cadenas ligeras de anticuerpos; estas fibras se depositan en los riñones, corazón, hígado, tracto digestivo y articulaciones. Es una enfermedad degenerativa, que aqueja típicamente a personas mayores de 60 años, debida a un desorden en las células del sistema inmune encargadas de sintetizar anticuerpos. Por razones desconocidas, en lugar de producir anticuerpos completos, se producen sólo las cadenas ligeras, las cuales se pliegan de forma anómala (fibras amiloides) y causan la disfunción del órgano en el que se depositan.

Hay dos tipos de cadenas ligeras en humanos, las kappa y las lambda. En individuos sanos, prevalecen las tipo kappa, mientras que en pacientes con AL, las cadenas lambda son las más comunes. Existen 31 clases de cadenas lambda; de éstas, veinte se han encontrado en pacientes con AL, y las clases 6a y 3r son las más comunes en la clínica (~40% de los casos). Los dominios variables son distintos en cada individuo, complicando el análisis de la etiología de AL. Se conocen las secuencias de aminoácidos para varias centenas de proteínas tipo lambda aisladas de pacientes con AL y de individuos sanos, y se tienen incluso estructuras cristalográficas para algunas de ellas. A pesar de haberlas buscado, no se han encontrado diferencias fisicoquímicas notables que permitan distinguir a las variantes causantes de AL de las inocuas.

Para poder formar una fibra amiloide, una proteína debe tener una secuencia de aminoácidos compatible con dicha estructura. Usando como template estructural el microcristal de una fibra amiloide, el servidor ZipperDB (<http://services.mbi.ucla.edu/zipperdb/>) construye y evalúa modelos de fibras amiloides formadas por secciones de seis aminoácidos contiguos, dando importancia a la complementariedad estérica y electrostática. Desliza una ventana de seis aminoácidos de longitud sobre la secuencia de aminoácidos de una proteína de prueba, e identifica aquellas regiones que son proclives a formar fibras amiloides.

En este trabajo aplicamos el algoritmo de ZipperDB a una colección de proteínas de la clase lambda obtenidas de pacientes con AL y de controles (individuos sanos o con mieloma múltiple, pero sin AL), y preguntamos lo siguiente:

- a) ¿Qué tan variables son las zonas pro-fibra para la colección de pacientes?
- b) ¿Qué tan variables son las zonas pro-fibra para los pacientes con distintas clases de cadena?
- c) Comparando las zonas pro-fibra de pacientes y de individuos sin AL, ¿es posible detectar regiones de la proteína consistentemente asociadas a la enfermedad?
- d) ¿Hay alguna característica estructural o propiedad fisicoquímica que distinga a las variantes formadoras de fibras de las inocuas?

Financiamiento: CONACYT 133294.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 09

**Potencial para formar fibras amiloides de fragmentos de anticuerpos de humanos II**

Diana Valenzo, Jessica Araujo, Liliana Martínez y Nina Pastor

Facultad de Ciencias, UAEM Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos  
[nina@uaem.mx](mailto:nina@uaem.mx)

La amiloidosis de cadena ligera (AL) es una enfermedad caracterizada por la deposición de fibras compuestas principalmente del dominio variable de las cadenas ligeras de anticuerpos; estas fibras se depositan en los riñones, corazón, hígado, tracto digestivo y articulaciones. Es una enfermedad degenerativa, que aqueja típicamente a personas mayores de 60 años, debida a un desorden en las células del sistema inmune encargadas de sintetizar anticuerpos. Por razones desconocidas, en lugar de producir anticuerpos completos, se producen sólo las cadenas ligeras, las cuales se pliegan de forma anómala (fibras amiloides) y causan la disfunción del órgano en el que se depositan.

Hay dos tipos de cadenas ligeras en humanos, las kappa y las lambda. En individuos sanos, prevalecen las tipo kappa, mientras que en pacientes con AL, las cadenas lambda son las más comunes. Existen 40 clases de cadenas kappa; de éstas, trece se han encontrado en pacientes con AL, y la clase O18/O8 es la más común en la clínica. Los dominios variables son distintos en cada individuo, complicando el análisis de la etiología de AL. Se conocen las secuencias de aminoácidos para varias decenas de proteínas tipo kappa aisladas de pacientes con AL y de individuos sanos, y se tienen incluso estructuras cristalográficas para algunas de ellas. A pesar de haberlas buscado, no se han encontrado diferencias fisicoquímicas notables que permitan distinguir a las variantes causantes de AL de las inocuas.

Para poder formar una fibra amiloide, una proteína debe tener una secuencia de aminoácidos compatible con dicha estructura. Usando como templado estructural el microcristal de una fibra amiloide, el servidor ZipperDB (<http://services.mbi.ucla.edu/zipperdb/>) construye y evalúa modelos de fibras amiloides formadas por secciones de seis aminoácidos contiguos, dando importancia a la complementariedad estérica y electrostática. Desliza una ventana de seis aminoácidos de longitud sobre la secuencia de aminoácidos de una proteína de prueba, e identifica aquellas regiones que son proclives a formar fibras amiloides.

En este trabajo aplicamos este algoritmo a una colección de proteínas de la clase kappa obtenidas de pacientes con AL y de controles (individuos sanos o con mieloma múltiple, pero sin AL), y preguntamos lo siguiente:

- a) ¿Qué tan variables son las zonas pro-fibra para la colección de pacientes?
- b) ¿Qué tan variables son las zonas pro-fibra para los pacientes con distintas clases de cadena?
- c) Comparando las zonas pro-fibra de pacientes y de individuos sin AL, ¿es posible detectar regiones de la proteína consistentemente asociadas a la enfermedad?
- d) ¿Hay alguna característica estructural o propiedad fisicoquímica que distinga a las variantes formadoras de fibras de las inocuas?
- e) ¿Este análisis permite explicar el exceso de cadenas lambda sobre las kappa en la clínica?

Financiamiento: CONACYT 133294.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

POSTER 10

**Potencial amiloidogénico de la línea germinal de los exones V de cadenas ligeras de inmunoglobulinas**

Liliana Martínez, Jéssica Araujo, Darely Gutiérrez, Ángel Santiago, Diana Valenzo,

\*David Villaseñor y Nina Pastor

Facultad de Ciencias y \*Facultad de Ciencias Biológicas, UAEM

La amiloidosis de cadena ligera (AL) es una enfermedad de plegamiento, causada por la agregación de dominios variables de cadenas ligeras de anticuerpos, en forma de fibras amiloides. Estas fibras tienen una estructura de  $\beta$ -cruzada altamente organizada. Las fibras se depositan en el espacio extracelular de órganos vitales, principalmente en riñón y corazón. Cada paciente de AL presenta una secuencia de aminoácidos única; las fibras contienen fragmentos de anticuerpos maduros que ya pasaron por el proceso de recombinación y de hipermutación somática. Los humanos tenemos 31 genes para exones V lambda, que se pueden combinar con uno de cuatro exones J para hacer un dominio variable tipo lambda. También tenemos 40 genes para exones V kappa, que se combinan con uno de cinco exones J para hacer un dominio variable tipo kappa. Este gran repertorio no se expresa de forma uniforme. En individuos sanos predominan las cadenas tipo kappa, pero en pacientes con AL dominan las cadenas tipo lambda, en particular las clases 6a y 3r.

Se ha sugerido que algunas de las mutaciones adquiridas en el proceso de maduración de los dominios variables son responsables de desestabilizar al estado nativo del dominio, causando desnaturalización parcial o total seguida de agregación en fibras amiloides. Para determinar si la prevalencia de ciertas clases de cadenas ligeras en la clínica depende de las propiedades de la línea germinal, en este trabajo exploramos el potencial que tienen los exones V kappa y lambda para formar fibras, antes de sufrir el proceso de maduración.

Se ha mostrado que regiones de cuatro a seis aminoácidos son suficientes para polimerizar como fibras amiloides, y se han obtenido microcristales de estas fibras. Usando uno de estos cristales como templado, el programa ZipperDB (<http://services.mbi.ucla.edu/zipperdb/>) calcula qué tan estable sería una fibra formada por una región de seis aminoácidos, buscando que haya complementariedad electrostática y estérica en el interior de la fibra. Aplicamos este programa a todas las secuencias de aminoácidos de línea germinal de los exones V kappa y lambda incluidos en la base de datos V-BASE (<http://vbase.mrc-cpe.cam.ac.uk/>). Para interpretar estructuralmente los resultados, obtuvimos estructuras cristalográficas de dominios variables con secuencias de línea germinal del Protein Data Bank (<http://www.pdb.org/pdb/home/home.do>); esto sólo fue posible para las clases K1-O18/O8 y L6a. Para las clases más representadas en la clínica (K1-L1, K1-L12, K1-O12/O2, K4-B3, L1b, L1c, L1e, L2a2, L3h y L3r), construimos modelos del exón V correspondiente con el exón J más común, con el programa I-TASSER (<http://zhanglab.ccmb.med.umich.edu/I-TASSER/>).

Consistente con lo observado en pacientes con AL, las cadenas tipo lambda tienen más regiones pro-amiloides que las cadenas tipo kappa. En particular, la clase 6a es la que más de estas regiones tiene. Al localizar las regiones pro-amiloides sobre las estructuras cristalográficas o los modelos hechos

con I-TASSER, notamos que aproximadamente la mitad de la proteína es proclive a formar fibras, aunque las regiones específicas cambian de clase en clase. Dado este alto potencial para formar fibras, lo notable es que la amiloidosis de cadena ligera es una enfermedad de baja prevalencia; esto hace pensar que hay muchas interacciones nativas que mantienen estas regiones pro-fibra inactivas.

Financiamiento: CONACYT 133294.



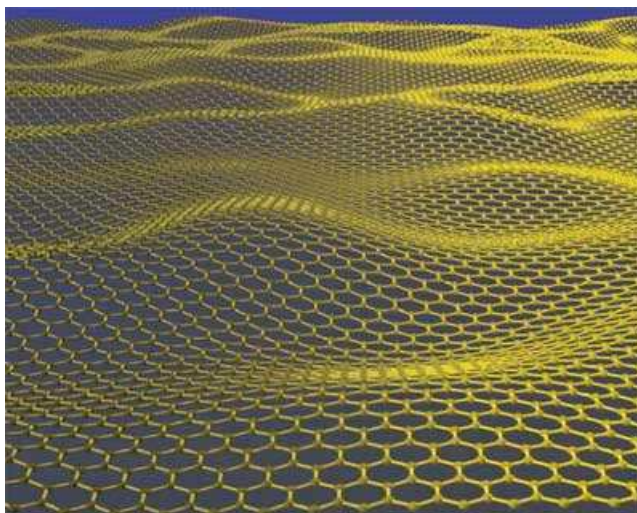
**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

POSTER 11

**Transmitancia en estructuras irregulares de grafeno**

D. S. Díaz-Guerrero. L. M. Gaggero-Sager. Fernando Montoya

Facultad de Ciencias, UAEM



Considerando la importancia tecnológica del grafeno, en este trabajo se estudia el efecto de estructuras irregulares tipo autosimilar en la transmitancia de electrones relativistas. La importancia de este tipo de estructuras radica en la gran gama de ámbitos físicos donde es posible encontrarlas, desde sistemas biológicos hasta aplicaciones tecnológicas. Por tal motivo es interesante ver que tipo de perfiles de transmitancia tienen asociados potenciales autosimilares como el potencial G-P y el de Cantor.

La razón principal de estudiar la transmitancia es en primer lugar la simplicidad que representa su cálculo y en segundo lugar su relación estrecha con las autofunciones del operador diferencial que describe a este sistema físico, esto es la posibilidad de identificar configuraciones (combinaciones de parámetros) que resulten importantes, ya sea por sus posibles aplicaciones o bien por su carácter puramente cualitativo.

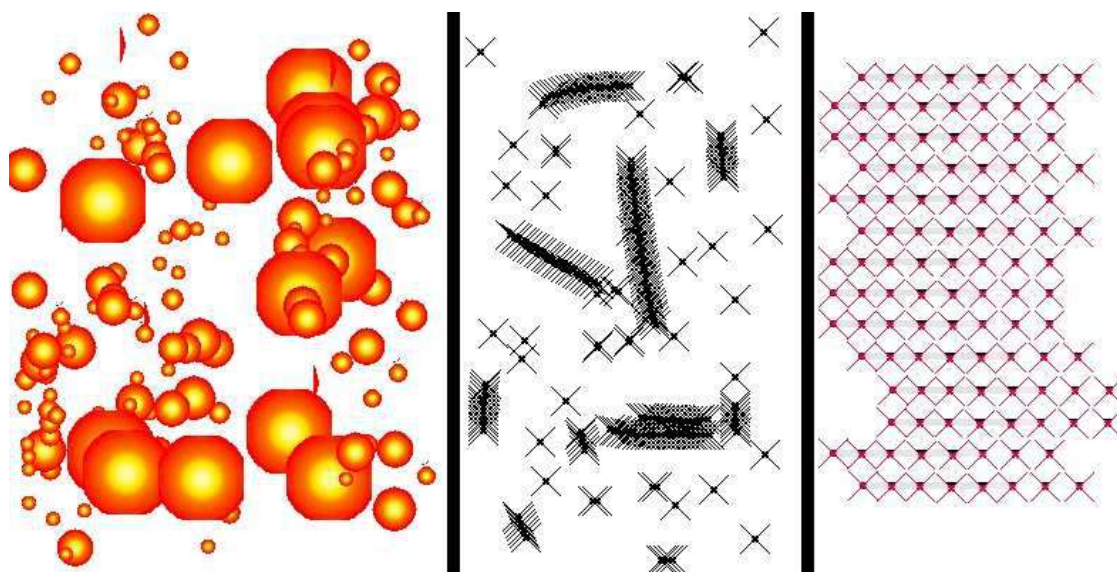
QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

POSTER 12

**Adquisición de datos estadísticos mediante el procesamiento de imágenes**

Fernando Montoya. Elizabeth Castillo. D. S. Díaz-Guerrero. Ramón González

Facultad de Ciencias, UAEM.



En este trabajo se describe un algoritmo de procesamiento de imágenes mediante el cual es posible extraer datos estadísticos de imágenes de muestras experimentales. Este tema es particularmente importante ya que cada vez la tecnología nos permite obtener información gráfica de micro y hasta nano – sistemas. Sin embargo, este tipo de imágenes son difíciles de analizar actualmente en parte debido al gran número de objetos que las componen.

La implementación de dicho algoritmo y su ampliación a distintos problemas experimentales permitirá la automatización de procesos que hasta el momento requieren un gran costo en tiempo y de los cuales no es posible obtener datos directamente. Como ejemplo de aplicación se usa el conteo de centros de replicación de adenovirus.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

POSTER 13

**Grafeno sometido a ondas electromagnéticas que inciden perpendicularmente:**

**Análisis de la estructura de bandas.**

Francisco Javier López Rodríguez

Departamento de Física.

Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, C. P. 62210.

Se estudia el espectro de energía del problema de grafeno sometido a radiación electromagnética que incide perpendicularmente. Para obtener el espectro, se resuelve la ecuación de Dirac con el campo electromagnético dado. Con tal problema se obtiene una ecuación generalizada de Mathieu. Los límites de campos fuertes y débiles, así como los casos de longitudes de onda corta y larga son analizados. El espectro de energía se obtiene numéricamente usando el método de Whittaker, se usa además teoría de perturbaciones para obtener la curva separatriz de estados permitidos. El espectro de energía presenta bandas y una brecha prohibida de energía cerca de la energía de Fermi. La brecha de energía prohibida tiene una dependencia lineal con la intensidad de la onda electromagnética.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 14

**Auto-similaridad en el espectro de los plasmones polaritónicos en una red fotónica unidimensional de Rudin-Shapiro**

H. A. Gómez-Urrea<sup>1</sup>, M. E. Mora-Ramos<sup>1</sup>, E. Reyes-Gómez<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México*

<sup>2</sup> *Instituto de Física, Universidad de Antioquia, A.A.1226., Medellín, Colombia*

Estudios teóricos acerca del espectro de frecuencias de los plasmones polaritónicos en redes unidimensionales de Rudin-Shapiro han sido realizados. En el presente trabajo se busca proporcionar evidencia adicional de la fractalidad en dichos sistemas. Con este fin se estudian las propiedades de auto-similaridad en las relaciones de dispersión que pueden producirse en superredes unidimensionales de materiales fotónicos bajo incidencia oblicua. Los sistemas físicos bajo estudio resultan de la repetición periódica de estructuras de Rudin-Shapiro. Se asume que el sistema está formado por capas pasivas con índices de refracción positivo e independiente de la frecuencia, y capas activas con una respuesta dispersiva tipo Drude tanto para la permitividad dieléctrica como para la permeabilidad magnética. El resultado del estudio muestra que la relación de dispersión obtenida exhibe un carácter auto-similar. Sin embargo, la inclusión de pérdidas ópticas a través de un factor de amortiguamiento destruye la auto-similaridad en el espectro de las frecuencias. Por lo tanto, una realización práctica de sistemas fotónicos de Rudin-Shapiro en una dimensión que tengan un comportamiento auto-similar podría no ser alcanzable.

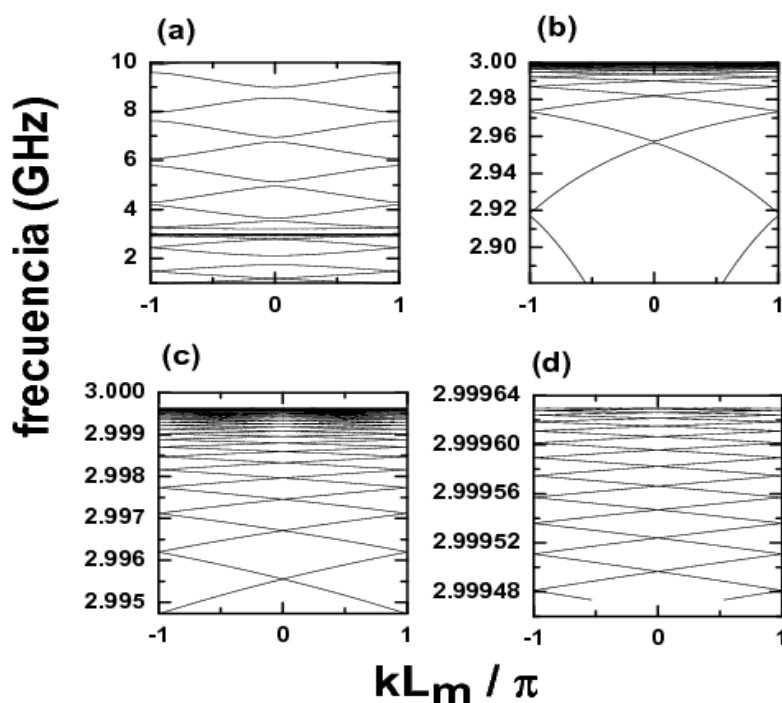


Fig. 1: Estructura de banda asociada a los modos transversales eléctricos en superredes periódicas cuya celda elemental viene dada por secuencias de Rudin-Shapiro de orden siete. Los resultados numéricos

fueron obtenidos para un ángulo de incidencia de  $\frac{\pi}{6}$ .

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**

**FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

POSTER 15

**Interfacial waves between two piezoelectric half-spaces with electro-mechanical imperfect interface**

JoséA. Otero<sup>1</sup>, Reinaldo Rodríguez-Ramos<sup>2</sup>, JuliánBravo-Castillero<sup>2</sup> y Guillermo Monsivais<sup>3</sup>

1 Instituto de Cibernética, Matemática y Física (ICIMAF), 15No. 551, Vedado, C.P. 10-400, La Habana, Cuba.

2 Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, Vedado, C.P. 10-400, La Habana, Cuba.

3 Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P.20-364, 01000 México, DF, México.

We study the propagation of shear horizontal waves between the interface of two piezoelectric material with an electro-mechanical imperfect contact. Mechanical and electrical imperfections are modeled by means of a spring and a capacitor, respectively. The corresponding mathematical expressions for the imperfect contact are given. The system of differential equations for the waves in the considered half space is derived and the associate solutions are found. A general expression for the dispersion relation no reported previously in literature is given in an explicit form and the diverse limit cases are analyzed in detail. In some of these limit cases new expressions are also obtained, which predict the existence of interfacial waves. In the other cases, when already reported results exist, a comparison with them is done. Some physical interpretations are derived from the limit cases.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 16

**Estudio metodológico de las fases I $\alpha$  y I $\beta$  de la celulosa**

Alejandra M. Navarrete-López\*, Ma. Luisa San Román, Claudio Zicovich-Wilson\*

\*Facultad de Ciencias, Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos. México

Debido a su abundancia, gran fuerza y dureza, biodegradabilidad y por ser un recurso renovable, la celulosa se ha perfilado como uno de los principales candidatos para la producción de bio-nanocompuestos. Un ejemplo son las nanofibras de celulosa y sus nanocristales (whiskers)<sup>1</sup> que han tomado gran interés debido a sus aplicaciones industriales, pues usados como aditivos mejoran substancialmente las propiedades mecánicas de medios poliméricos en forma muy barata y efectiva. La celulosa es un polímero lineal constituido por unidades de D-glucopiranosas conectadas por medio de enlaces glicosídicos  $\beta(1\rightarrow4)$ . Los grupos hidroxilo libres presentes en las cadenas, forman puentes de hidrógeno inter e intramoleculares, y se ordenan en placas bidimensionales que a su vez se ensamblan en estructuras tridimensionales. Dando como consecuencia la existencia de cuatro alotrópos, siendo uno de ellos la celulosa I la cual presenta dos formas cristalinas coexistentes, I $\alpha$  y I $\beta$ . De aquí la importancia de establecer una metodología eficaz usando cálculos ab initio periódicos que describan correctamente el comportamiento de la estructura electrónica de los sistemas. Se presentan los resultados preliminares de las geometrías de celulosa utilizando el código CRYSTAL09<sup>2</sup> con la corrección de dispersión de Grimme<sup>3</sup>, usando los funcionales B3LYP, PBE, PBE0 y dos conjuntos de base, lo que permitirá determinar la metodología adecuada y así los mecanismos que gobiernan las transiciones de fase, el plegamiento y otras propiedades fisicoquímicas como la absorción.

(1) Van den Berg, O. S., M.; Capadona, J. R.; Weder, C. *Journal of Materials Chemistry* **2007**, *17*, 2746.

(2) <http://www.crystal.unito.it>.

(3) Grimme, S. *Journal of Computational Chemistry* **2006**, *27*, 1787.

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

POSTER 17

**Propagation of Dirac electrons in Fibonacci graphene multilayers**

H. García-Cervantes, J. C. Martínez-Orozco, J. Madrigal-Melchor, I. Rodríguez-Vargas

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

We study the propagation properties of Dirac electrons in Fibonacci graphene multilayers. The multilayer system is built alternating substrates that non- open (SiO<sub>2</sub>) and open (SiC) energy gap in the electronic structure of graphene when it is deposited on them. Then, following the substitution rules of the Fibonacci sequence,  $g(A)=AB$  and  $g(B)=A$ , we have created the Fibonacci multilayer system. The Transfer Matrix approach has been adopted to the Dirac equation to obtain the propagation properties of this system. Particularly, we have analyzed the transmittance of one, two and three graphene layers for different Fibonacci generations and widths of the SiO<sub>2</sub> and SiC substrates. Likewise, we have compared the propagation properties of the Fibonacci multilayers with respect to other aperiodic and periodic multilayer structures.

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

POSTER 18

**Transmission and transport properties of non-resonant graphene structures: The case of monolayer, bilayer and trilayer graphene Wave-Function Extension Transistors**

R. Rodríguez-González, J. Madrigal-Melchor, I. Rodríguez-Vargas

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

Recently a novel vertical field-effect transistor, Wave-Function Extension Transistor (WET), has been demonstrated by Sciambi and colleagues [A. Sciambi, M. Pelliccione, M. P. Lilly, S. R. Bank, A. C. Gossard, L. N. Pfeiffer, K. W. West, and D. Goldhaber-Gordon, Phys. Rev. B **84**, 085301 (2011)]. This special transistor works on the basis of depleting one layer such that its associated wave-function extends until it overlaps other layer wave-function increasing the tunneling current of a GaAs/AlGaAs device by two orders of magnitude at cryogenic temperatures. In the present work, we study theoretically the transmission and transport properties of non-resonant graphene structures which are built sitting a monolayer, bilayer or trilayer graphene sheets onto an special arrangement of alternating substrates of SiO<sub>2</sub> and SiC, that energetically resemble the WET configuration. We find that the transport properties depend strongly on the width of the barrier region that divides the layers which sustain the wave-functions. Besides, tailoring the parameters of the system it is possible to improve the conductance with respect to the resonant graphene structures.



**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 19

**Dispersión de ondas SV en multilaminados piezoeléctricos**

Joanka Hernández Cabanas<sup>1</sup>, José A. Otero Hernández<sup>1</sup>, Rolando Pérez Alvares<sup>2</sup> y Guillermo Monsiváis Galindo<sup>3</sup>

1 Instituto de Cibernética, Matemática y Física (ICIMAF), 15 No. 551, Vedado, C.P. 10-400, La Habana, Cuba.

2 Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Estado de Morelos, México.

3 Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 20-364, 01000 México, DF, México.

En este trabajo se presenta un modelo teórico para estudiar la propagación de las ondas SV en multilaminados piezoeléctricos. Transformando las ecuaciones de Newton y Maxwell para un material piezoeléctrico, al considerar que los desplazamientos y el potencial son independientes de la coordenada  $x_2$  y que el desplazamiento en la dirección  $x_2$  es igual a cero, se obtienen las ecuaciones diferenciales a derivadas parciales que describen las ondas SV para este tipo de material. Se considera una estructura periódica del tipo A/B/A/B.../A/B en la cual las intercaras son perpendiculares al eje de coordenada  $x_1$  y el eje de polarización de los piezoeléctricos está en la dirección  $x_3$ , que es paralelo a las intercaras. Para obtener los coeficientes de reflexión y transmisión del multilaminado se utiliza el método de la matriz de transferencia con adecuadas condiciones de contacto y contorno. Resultados numéricos son presentados para ilustrar el comportamiento de los coeficientes de transmisión y reflexión en función de la frecuencia para diferentes combinaciones de materiales.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**FACULTAD DE CIENCIAS**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 9-12, 2012**

POSTER 20

**Estudio de la superficie de zeolitas naturales usando cálculos cuánticos periódicos**

Karell Valdivies Cruz y Anabel Lam\*

Laboratorio de Ingeniería de Zeolitas, Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales (IMRE),  
Universidad de La Habana, Habana 10400, Cuba.

\*anabel@fisica.uh.cu

Entre las zeolitas más abundantes en la naturaleza se encuentra la clinoptilolita, cuyas propiedades de adsorbente y de intercambiador iónico han permitido su uso como catalizador, en la descontaminación de aguas residuales, como fertilizante, en el tratamiento de determinadas patologías, entre otras aplicaciones. La superficie de las zeolitas controla los procesos de adsorción, difusión e intercambio iónico que ocurren en las mismas. En este sentido, el estudio a nivel atómico de la estructura de estas superficies es de interés para una mejor comprensión de las propiedades ligadas a aplicaciones prácticas. En este marco, los métodos computacionales han demostrado ser un buen complemento de las técnicas experimentales que se usan para estudiar la estructura superficial de estos materiales. En el presente trabajo estudiamos la estructura atómica de la superficie de clinoptilolitas sódicas y ácidas usando los métodos cuánticos periódicos implementados en el programa SIESTA [1,2]. Dos sistemas fueron explorados: una clinoptilolita sódica y otra ácida, formados por una celda elemental de clinoptilolita que contiene 20 moléculas de agua. Las condiciones periódicas, que garantizan la existencia de un cristal infinito, son eliminadas en uno de los ejes con el fin de crear una superficie en el material. Este hecho no provoca cambios en los parámetros de red del material. Asimismo, de la interacción del agua con el enrejado se observa la formación de grupos  $H_3O^+$  tanto en la superficie externa como en el interior del enrejado de la estructura ácida, ver Figura.

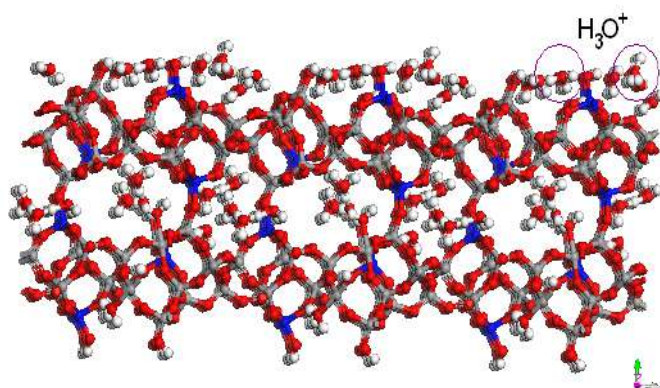


Figura. Cristal de clinoptilolita ácida con superficie creada en el plano 010. Los oxígenos están representados por esferas rojas. Los aluminio, silicio e hidrógeno por esferas azules, grises y blancas, respectivamente.

[1] P. Ordejón, E. Artacho, J. M. Soler, Self-consistent order-N density-functional calculations for very large systems, Phys. Rev. B 53 (1996) 10441.

[2] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. García, J. Junquera, P. Ordejón, D. S. Sánchez-Portal, The Siesta method for ab initio order-N materials simulation, J. Phys. Condens. Matter 14 (2002) 2745-2779.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

POSTER 21

**Influencia de la dirección de polarización en las propiedades efectivas de un medio magneto-electro-elástico heterogéneo.**

Hans Hernández Cabanas, Joanka Hernández Cabanas, José Antonio Otero Hernández

En los medios piezoeléctricos y piezomagnéticos no todos los dominios están orientados en la misma dirección, lo que sucede es que existe una dirección preferencial en la orientación de la polarización. Las direcciones de polarización de los dominios de estos medios siguen una distribución gaussiana, cuya media coincide con la dirección preferencial. En el caso de los medios compuestos magneto-electro-elásticos se manifiesta este fenómeno en cada fase. En este trabajo se determinan las propiedades efectivas de un material compuesto laminado formado por un conjunto de celdas que se distribuyen periódicamente en una dirección. Cada celda está formada por un número de láminas de  $\text{BaTiO}_3$  y  $\text{CoFe}_2\text{O}_4$ . Cada lámina es una fase independiente en la cual la orientación de polarización y la razón volumétrica se determinan por los parámetros de una distribución gaussiana. Se presenta la influencia de la orientación de la polarización en las propiedades efectivas del compuesto.

QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012

POSTER 22

**Propiedades efectivas axiales de materiales reforzados por fibras laminadas**

Yanely Zaldivar Gerpe, Yoanh Espinosa Almeyda

Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, Cuba.

E-mail: [y.zaldivar@lab.matcom.uh.cu](mailto:y.zaldivar@lab.matcom.uh.cu), [yeayanely@matcom.uh.cu](mailto:yeayanely@matcom.uh.cu)

Las expresiones analíticas de las propiedades axiales para un compuesto donde los refuerzos son fibras multilaminadas han sido obtenidas usando el método de homogeneización asintótica (AHM). Las fibras han sido alineadas determinando paralelogramos que constituyen las celdas de periodicidad.

Este trabajo es una extensión de trabajos previos que han estudiado compuestos bifásicos bajo condiciones de perfecta adhesión entre las fases y las constituyentes exhiben propiedades elásticas transversalmente isotrópicas. Se resolvieron dos problemas sobre la celda periódica usando funciones armónicas doblemente periódicas para obtener dichas propiedades efectivas.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

POSTER 23

**The hydrostatic pressure effects on intersubband optical absorption of n-type  $\delta$ -doped quantum well  
in GaAs**

O. Oubram<sup>1</sup>, O. Navarro<sup>1</sup>, L. M. Gaggero Sager<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado  
Postal 70-360, México D.F 04510, México

<sup>2</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col.  
Chamilpa, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

Email: [oubram@uaem.mx](mailto:oubram@uaem.mx), [navarro@unam.mx](mailto:navarro@unam.mx), [lgaggero@uaem.mx](mailto:lgaggero@uaem.mx),

We have theoretically calculated the effects of hydrostatic pressure on subband structure and optical transitions in n-delta-doped quantum well (DDQW) in GaAs for different values of energy. The electronic structure of DDQW under the hydrostatic pressure is determined by solving the Schrödinger equation and a simple algebraic method. From our calculations, it is found that the subband energies and intersubband optical absorption is quite sensitive to the applied hydrostatic pressure. This gives a new degree of freedom in various device applications based on the intersubband transitions of electrons.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

POSTER 24

**Effect of hydrostatic pressure on a Schottky barrier of metal/n-GaAs**

O. Oubram<sup>1</sup>, O. Navarro<sup>1</sup>, L. M. Gaggero Sager<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 70-360, México D.F 04510, México

<sup>2</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

Email: [oubram@uaem.mx](mailto:oubram@uaem.mx), [navarro@unam.mx](mailto:navarro@unam.mx), [lgaggero@uaem.mx](mailto:lgaggero@uaem.mx),

The effect of hydrostatic pressure (HP) on a Schottky barrier diode (SBD) of metal/n-GaAs is studied using an algebraic formalism. The results show that an increment in the HP produces an increment in the barrier height and differential capacity. The conclusions of this formalism are in agreement with experimental results and give an excellent way to analyze HP effects on this system. We also show that with this formalism the effective mass variation with HP can be determined readily and correlated with the experimental data by standard techniques such as differential capacitance.

**QUINTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
FACULTAD DE CIENCIAS  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 9-12, 2012**

POSTER 25

**Propiedades de invarianza y simetría en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga.**

D. Villegas<sup>1</sup>, F. de León Pérez<sup>2</sup> y R. Pérez Álvarez<sup>3</sup>

1-Departamento de Física, Universidad Central “Marta Abreu” de Las Villas, Santa Clara, Villa Clara, Cuba.

2-Instituto de Ciencia de Materiales de Aragón (ICMA) & Departamento de Física de la Materia Condensada, Facultad de Ciencias, Universidad de Zaragoza Zaragoza, España.

3-Facultad de Ciencias, UAEM, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

En el presente trabajo partiendo de principios generales; tales como la invarianza ante la inversión en el tiempo y la invarianza ante la reflexión espacial de la ecuación de onda y la conservación del flujo de la densidad de energía se obtienen teóricamente las propiedades básicas de la matriz de transferencia en el tunelaje de fonones de longitud de onda larga a través de una heteroestructura semiconductor. Estas propiedades permiten demostrar la equivalencia existente entre los tiempos totales de transmisión y reflexión en el tunelaje de fonones acústicos y ópticos a través de una barrera de forma arbitraria.

Referencias

1-E. H. Hauge, J. P. Falck, y T. A. Fjeldly, “Transmission and reflection times for scattering of wave packets off tunneling barriers”, Phys. Rev. B, 36, 4203 (1987).

2-J. P. Falck y E. H. Hauge, “Larmor clock reexamined”, Phys. Rev. B 38, 3287 (1988).

3-J. G. Muga, R. S. Mayato, y I. L. Egusquiza, “Time in Quantum Mechanics” (Springer-Verlag, Heidelberg, Germany, 2001).

4- V.S. Olkhovsky, E. Recami, J. Jakiel, “Unified time analysis of photon and particle tunneling”, Phys. Rep. 398 (2004).

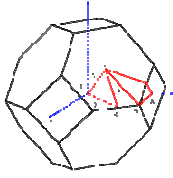
5-D. Villegas, F. León-Pérez y R. Pérez-Álvarez, “Tunneling time of long-wavelength phonons through semiconductor heterostructures”, Phys. Rev B 71, 035322 (2005).

6-D. Villegas, “Tiempo de tunelaje de fonones a través de una heteroestructura semiconductor”, Tesis de doctorado, (2011).

7-D. Villegas, F. León-Pérez y R. Pérez-Álvarez, “Resonant and non-resonant tunneling through a phonon double barrier”, no publicado, (2011).

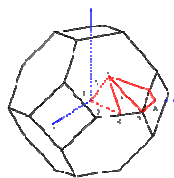






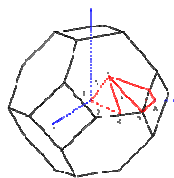
**Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular**

**Cuernavaca, 9-12 de enero de 2012**



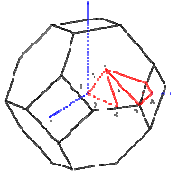
## **Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular**

**Cuernavaca, 9-12 de enero de 2012**



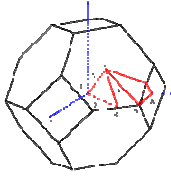
## **Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular**

**Cuernavaca, 9-12 de enero de 2012**



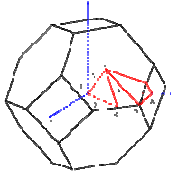
## **Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular**

**Cuernavaca, 9-12 de enero de 2012**

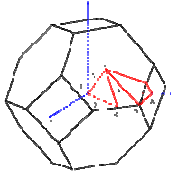


**Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular**

**Cuernavaca, 9-12 de enero de 2012**

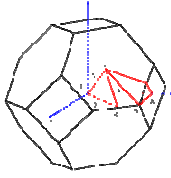


**Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular**  
**Cuernavaca, 9-12 de enero de 2012**



## **Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular**

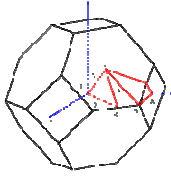
**Cuernavaca, 9-12 de enero de 2012**



**Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular**

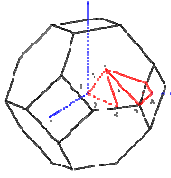
**Cuernavaca, 9-12 de enero de 2012**





**Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular**

**Cuernavaca, 9-12 de enero de 2012**



**Quinto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular**

**Cuernavaca, 9-12 de enero de 2012**