

**Lunes 24 DE JUNIO. SESIÓN PRESENCIAL DE FÍSICA DE LA MATERIA
CONDENSADA**

Preside la sesión de la mañana: Dr. Rolando Pérez Álvarez

Link para los conferencistas virtual:		
10:00-10:05	INAUGURACIÓN	
CONFERENCIA PLENARIA		
10:05-11:00	Selectividad en la electrónica molecular dependiente de la quiralidad	José Eduardo Barrios Vargas
CONFERENCIAS		
11:00-11:30	Influencia del efecto de Aharonov-Bohm en la transmisión de un sistema mixto de grafeno con kekule-o	Jorge Alfonso Lizarraga Brito
11:30-12:00	Polarización de valles-espines y transporte anómalo producto de la periodicidad en una superred magnética de MoS ₂ con asimetría estructural	P. Villasana-Mercado, J. G. Rojas-Briseño, S. Molina-Valdovinos, I. Rodríguez-Vargas
12:00-12:30	Resonancias Fano en una unión de fosforeno	Karla Jhoana Lamas-Martínez, José Alberto Briones-Torres, Sergio Molina-Valdovinos y Isaac Rodríguez-Vargas
12:30-13:00	Magnetorresistencia anómala y polarización perfecta de valles y espín en uniones magnéticas de MoS ₂	J.G. Rojas-Briseño, P. Villasana-Mercado, S. Molina-Valdovinos, I. Rodríguez-Vargas
13:00-13:15	Heteroestructura híbrida a base de crystal fotónico 2d del grupo P4G	Marco A. Tun-Carrillo, Miguel E. Mora-Ramos, Ignacio Perez-Quintana
13:15 –16:00	RECESO	
Preside la Sesión de la Tarde : Dr. Outmane Oubram		
CONFERENCIA PLENARIA		
16:00-17:00	Presencia Del Tuneleo de Klein en Redes Ssh Barbudas con una Banda Plana Modificada	Guillermo Monsiváis Galindo, Yonatan Betancur Ocamp
CONFERENCIAS		
17:00-17:30	Las propiedades de transporte y termoeléctricas en estructuras multi-potenciales autosimilares	M. Miniya, L. M. Gaggero-Sager, O. Oubram, I Rodríguez-Vargas
17:30-18:00	Deslocalización en superredes desordenadas de grafeno: el efecto dimérico	R. Rodríguez-González, H. García-Cervantes, F. J. García-Rodríguez, Gerardo J. Escalera Santos, and I. Rodríguez-Vargas
18:00-18:30	Relaciones de Kramers-Krönig en modelos	Angela Camacho de la Rosa,

	de conducción de calor	Rolando Pérez Álvarez
18:30-19:00	Transporte balístico en superredes aperiódicas en fosforeno	E.J. Guzman , O. Navarro, O. Oubram, I. Rodríguez-Vargas

**Martes 25 DE JUNIO. SESIÓN PRESENCIAL DE FÍSICA DE LA MATERIA
CONDENSADA**

Preside la sesión: Dr. Isaac Rodríguez-Vargas

Link para los conferencistas virtual:		
CONFERENCIA PLENARIA		
10:00-11:00	Metamateriales y metasuperficies multicomponentes	W. Luis Mochán , Guillermo P. Ortiz
CONFERENCIAS		
11:00-11:30	El efecto Goos-Hänchen para modos vibracionales acústicos y ópticos en una película delgada semiconductor	Diosdado Villegas , Zorayda Lazcano y Jesús Arriaga, Rolando Pérez Álvarez, Fernando de León Pérez
11:30-12:00	Síntesis Y Caracterización De Perovskitas Dobles Y Simples	Tania Elizabeth Soto Guzmán
12:00-12:15	Prediction of the photovoltaic performance of the lead-free layered Ruddlesden–Popper organic-inorganic perovskite (CH ₃ NH ₃) ₂ GeI ₄	Khaoula Ouassoul
12:15-12:30	Estudios ab-initio de la antiperovskita (LiFe) ₃ SO para el uso de almacenamiento de energía	Eduardo Azael Hoy Canul , Joana Xool Aban, Zakaryaa Zarhri
12:30-13:00	Enfoque de puntos especiales para el cálculo del coeficiente de absorción óptica en películas de puntos cuánticos de perovskita	Carlos I. Cabrera , Rolando Pérez- Álvarez
13:00-16:00	RECESO	
Preside la Sesión de la Tarde : Dr. Sergio Molina-Valdovinos, Dr. J.G. Rojas-Briseño		
16:00-16:30	Fragment-Asperity Interaction Model (scp) Model Reproduces Q-Values of Occurring Seisms	Oscar Sotolongo Costa
16:30-17:00	Autómatas Celulares para la Simulación y Optimización de Emisiones y Flujo de Tráfico en Sistemas de Dos Rutas	Rachid Marzoug , Beatriz Castillo Téllez, Gerardo Alberto Mejía Pérez, Carlos Vega Jesahel, Margarita Castillo Téllez
17:00-17:30	Desorden estructural en el delta dopado	Humberto Noverola Gamas , Outmane Oubram, Luis Manuel Gaggero Sager, Eddy Rabanales Márquez
17:30-17:45	Caminos de corriente atómicamente finos en grafeno Kekulé-O	Santiago Galván y García , Thomas Stegmann, Yonatan

		Betancur Ocampo y Francisco Sánchez Ochoa
17:45-19:00	SESIÓN DE LOS CARTELES	

MARTES 25 DE JUNIO. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES.

Preside la sesión: Dr. Maykel Courel Piedrahita, Dra. María de Lourdes Albor Aguilera y Dr. Fernando Javier Sánchez Rodríguez

Link para los conferencistas virtual: <https://meet.google.com/yfd-evqp-iob>

Horario	Título	Autores
CONFERENCIA PLENARIA		
9:00 – 10:00	El despliegue de la energía fotovoltaica; Tecnología de celdas solares	Yasuhiro Matsumoto
CONFERENCIAS		
10:00 – 10:20	Estudio de uniones tunel de arreglos MxN de Hilos Cuánticos para aplicaciones fotovoltaicas: Control de Dopantes y Perspectivas sobre Cristales de Wigner	<u>Reyna Méndez-Camacho</u> , Máximo López-López y Esteban Cruz-Hernández
10:20 – 10:40	El nanocarbono dentro del mundo inorgánico de las celdas solares de Sb_2S_3	Oscar Andrés Jaramillo-Quintero
10:40 – 11:00	Elaboración de nanopartículas de $AgSbS_2$ para su desarrollo como capa absorbente en dispositivos fotovoltaicos	<u>M.V. Morales Gallardo</u> , R.G Sotelo Marquina, N. R. Mathews, X. Mathew
11:00 – 11:20	El camino para superar los bajos valores de eficiencia en las celdas solares basadas en SnS: un estudio de los diferentes mecanismos de recombinación usando scaps 1-d	<u>F.J. Sánchez Rodríguez</u> , I. Montoya de los Santos, Maykel Courel
11:20 – 11:40	Study on the thermoelectric properties of $(Bi_xSb_{1-x})_2Se_3$ thin films	<u>Itzayana Segundo Suarez</u> , R.G. Sotelo Marquina, X. Mathew, N.R Mathews
11:40 – 12:00	Celdas basadas en SnS, desafíos para mejorar la eficiencia	Fernando Ayala Mató
12:00 – 13:00	RECESO	
13:00 – 13:20	Metodología-Verde para el depósito de películas delgadas por la técnica de Depósito por Baño Químico	María de Lourdes Albor Aguilera

13:20 – 13:40	Influencia de la variación de temperatura en el depósito de películas delgadas de CdS por DBQ	<u>JM Flores-Marquez</u> , C Hernandez-Vasquez, MA González-Trujillo, Y Matsumoto-Kuwabara, ML Albor-Aguilera
13:40 – 14:00	Desempeño de contactos metálicos en el desarrollo de Celdas solares del Tipo CdS/CdTe	<u>C. Hernandez Vasquez</u> , J.M. Flores Marquez, M.A. González Trujillo, M.L. Albor Aguilera
14:00 – 14:20	Celda solar con absorbedor $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4/\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{SSe})_4$ incorporando pozos cuánticos: resultados de simulación bajo condiciones reales	<u>Karina G. Rodríguez Osorio</u> , Maykel Courel
14:20 – 14:40	Study of the postdeposition thermal treatment of Sb_2S_3 thin films deposited by hydrothermal method	<u>R .G. Sotelo Marquina</u> , N.R Mathews, X. Mathew
14:40 – 15:00	Estudio de la reducción del Mn^{4+} a Mn^{2+} en el PbTiO_3 a través de EPR	Daniel Ramírez Rosales
15:00 – 15:20	Estudio DFT de la densidad de estados electrónicos de las aleaciones CdTe, GaAs y CdS	<u>G. Ramírez-Dámaso</u> , J. E. White-Narváez y F. L. Castillo-Alvarado

**DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y
MOLECULAR • JUNIO 24-26, 2024**

**MARTES 25 de JUNIO de 2024. SESIÓN DE CÁLCULOS DE PRIMEROS
PRINCIPIOS • Preside la sesión Juan Manuel Ramírez de Arellano**

**Sesión virtual a partir de las 10h00 en el siguiente enlace de Zoom:
<https://us02web.zoom.us/j/81394515301?pwd=bllLMldTcThiRTZEWewzYllmU09qQT09>**

O con la siguiente ID de Zoom: 813 9451 5301 (contraseña: 988 910).

Horario	Título	Autores
10h00-10h30	Estudio de la adsorción de átomos de litio en una nanoestructura de carbono formada por un semifullereno (C30) y una capa de grafeno.	Mónica Araceli Canales Lizaola, Juan Manuel Ramírez de Arellano, Luis Fernando Magaña Solís, Juan Salvador Arellano Peraza
10h30-11h00	Cálculo de primeros principios en carburos monocapa MXenos.	Nadxieli Delgado Jiménez
11h00-11h30	Átomo de hidrógeno confinado en presencia de un campo magnético: entropía de Shannon.	Marisol R. Arcos, Adrián M. Escobar
11h30-12h00	Sensores de gas y diseño de materiales «halfmetall» utilizando metales sustitucionales en vacancias de azufre de monocapas de disulfuro de Tungsteno: adsorción de moléculas de NO, CO y O ₂	Eduardo Rangel Cortés, Alan Joel Miralrío Pineda
12h00-12h30	Estructura electrónica de Siliceno y Siliceno dopado y sus aplicaciones en transistores de efecto de campo	Sebastián Pérez Patricio, Emiliano Montaño G, Roxana M. del Castillo

MARTES 24 de JUNIO. SESIÓN DE FÍSICA MATEMÁTICA. Preside la sesión José Antonio Otero Hernández y Ernesto Manuel Hernández Cooper. Sesión en línea a través de la liga <https://itesm.zoom.us/j/4413461079>

MARTES 25 DE JUNIO DE 2024		
Preside la sesión de la mañana Ernesto Manuel Hernández Cooper		
10:00-11:00	Reinaldo Rodríguez-Ramos Y. Espinosa-Almeyda, J. A. Otero, H. Camacho-Montes, P. Rodríguez-Bermúdez, F. J. Sabina	Compuestos multi-laminados elásticos micropolares. Propuesta para una posible reparación de fractura ósea
11:00-11:30	Yoanh Espinosa-Almeyda R. Rodríguez-Ramos, J. A. Otero, H. Camacho-Montes, P. Rodríguez-Bermúdez, F. J. Sabina	Propiedades efectivas de compósitos elásticos trifásicos reforzados con fibras unidireccionales diferentes y no concéntricas
11:30-12:00	Héctor Camacho Montes Y. Espinosa Almeyda, J. D. Gamboa Garay, L. E. Barraza de León, A. Vega Siverio, I. M. Espinoza Ochoa, J.O: Herrera Robles, J. A. Otero Hernández, R. Rodríguez Ramos, B. J. Mederos Madrazo, F. J. Sabina, R. K. Bordia	Ceramic sintering and properties characterization based on solid mechanics
12:00-12:30	José A. Otero Y. Espinosa-Almeyda, R. Rodríguez-Ramos	Método semianalítico de elementos finitos aplicado para el cálculo de propiedades efectivas en compuestos fibrosos micropolares
12:30-13:00	Filiberto Ramírez-Ramírez A. Morales, L. Gutiérrez, G. Monsiváis y J. A. Otero	Obtención numérica de los modos normales en una placa, a partir de su simetría
13:00-15:00	RECESO	
Preside la sesión de la tarde José Antonio Otero Hernández		
15:00-15:30	Gerardo Díaz Martínez	Efecto de la ocurrencia de réplicas sísmicas sobre estructuras de acero de pequeña y mediana altura desplantadas en suelos blandos de la CDMX
15:30-16:00	Ernesto Hernández Cooper José A. Otero, Rubén D. Santiago Acosta	Unidad de almacenamiento de energía térmica por calor latente, basado en un compuesto de micro-encapsulados de sales solares como materiales de cambio de fase (MCF) en una matriz de concreto
16:00-16:30	Rubén D. Santiago Acosta Ernesto Hernández Cooper, José A. Otero	Capacidad de almacenamiento en MPCMs
16:30-17:00	Jesús Cerezo Román	Análisis térmico de un sistema de enfriamiento solar con almacenamiento de energía con cambio de fase y una válvula de templado.

17:00-17:30	Mario I. Estrada Delgado Zurika I. Blanco-Garcia	Controlando la estadística de multifotones.
17:30-18:00	Jorge Becerril	Controlabilidad obstaculizada en simplejos bidimensionales

**DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
LUNES 24. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA**

LUNES 01. 10:05-11:00 (CONFERENCIA PLENARIA)

Selectividad en la electrónica molecular dependiente de la quiralidad

José Eduardo Barrios Vargas

Depto. Física y Química Teórica, Facultad de Química, UNAM.
j.e.barrios@gmail.com

La quiralidad es una propiedad geométrica de la materia que puede estar presente en diferentes escalas, especialmente a nivel nanoscópico. Investigamos la manifestación de la quiralidad en el transporte electrónico a través de una unión molecular cuando un clúster metálico quiral unido al electrodo de origen. Obtuvimos un transporte electrónico sin espín diferente entre las moléculas R y L debido a la presencia del clúster metálico quiral. Para evaluar el transporte electrónico, utilizamos el método de la función de Green en no equilibrio. Nuestros resultados teóricos destacan la importancia de los clústeres metálicos con tamaños específicos y estructuras quirales en el transporte electrónico y apoyan los resultados experimentales publicados previamente que exhibieron mediciones de túnel de barrido dependientes de la quiralidad con puntas intrínsecamente quirales.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
LUNES 24. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

LUNES 02. 11:00-11:30

Influencia del efecto de Aharonov-Bohm en la transmisión de un sistema mixto de grafeno con kekule-o

Jorge Alfonso Lizarraga Brito

Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, 62210
Cuernavaca, Mexico
jorge_lizarraga@icf.unam.mx

Se utiliza un sistema dos dimensional mixto compuesto por grafeno y kekule-o, siendo este último el que sirve como aislante del sistema y que se aprovecha para hacerle pasar un flujo magnético constante y localizado de tal forma que fuera de la región aislada el flujo es cero. Con este arreglo, el grafeno se ve influenciado por el potencial magnético y no por el campo en sí, lo que se conoce como el efecto de Aharonov-Bohm. La transmisión del sistema en dos sitios opuestos de la hoja de grafeno es calculada utilizando el método de funciones de Green fuera del equilibrio, mostrando que la transmisiones son oscilantes y además hay una relación inversa entre ellas. Esto muestra que con este fenómeno es posible controlar la dirección de flujo de los electrones.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
LUNES 24. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

LUNES 03. 11:30-12:00

Polarización de valles-espines y transporte anómalo producto de la periodicidad en una superred magnética de MoS_2 con asimetría estructural

P. Villasana-Mercado, J. G. Rojas-Briseño, S. Molina-Valdovinos, I. Rodríguez-Vargas

Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento, 98160 Zacatecas, Zacatecas, México
patricia.villasana@uaz.edu.mx

En el presente trabajo se plantea el estudio de superredes magnéticas periódicas de MoS_2 con asimetría estructural para calcular las polarizaciones de valles-espines y la magnetorresistencia de tunelamiento (TMR). Es de nuestro interés su aplicación para dispositivos versátiles que sean de utilidad tanto para el procesamiento como para la lectura de información, para lo cual se busca tener un cambio de polarización de valles-espines al variar la polaridad de la magnetización y a su vez tener una TMR alta. En reportes previos se ha logrado obtener estructuras versátiles para superredes magnéticas de siliceno en las cuales fue necesario inducir asimetría estructural [1]. Para las superredes periódicas de MoS_2 simétricas, se logró tener dos estados de polarización bien definidos, pero al fijar una configuración de magnetización antiparalela y variando el potencial electrostático. Además, es de importancia mencionar que en estas superredes simétricas se tiene un transporte anómalo al presentarse TMR negativa. En el caso de superredes magnéticas periódicas de MoS_2 con asimetría estructural se logra tener dos estados de polarización bien definidos al cambio de la magnetización al fijar el potencial electrostático.

[1] J. G. Rojas-Briseño, M. A. Flores-Carranza, P. Villasana-Mercado, S. Molina-Valdovinos, and I. Rodríguez-Vargas, Tunneling magnetoresistance and spin-valley polarization in magnetic silicene superlattices, Phys. Rev. B **103**, 155431 (2021).

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
LUNES 24. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

LUNES 04. 12:00-12:30

Resonancias Fano en una unión de fosforeno

Karla Jhoana Lamas-Martínez¹, José Alberto Briones-Torres², **Sergio Molina-Valdovinos¹**
y Isaac Rodríguez-Vargas¹

¹Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad
Autónoma

de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM
Ciudad del Conocimiento, 98160 Zacatecas, Zacatecas, México.

²Ingeniería en Nanotecnología, Universidad de La Ciénega del Estado de Michoacán de
Ocampo, Avenida Universidad 3000, Col. Lomas de la Universidad, 59103 Sahuayo,
Michoacán, México.

sergiomv@uaz.edu.mx

Las resonancias de Fano aparecen en muchos fenómenos físicos debido al acoplamiento de estados continuos y discretos. En las uniones formadas en una bicapa de grafeno, a incidencia oblicua, la coincidencia quiral entre los estados de los electrones fuera de la barrera electrostática y los estados acotados de los huecos dentro de la barrera da lugar a una forma asimétrica en la probabilidad de transmisión como función de la energía (resonancia de Fano). En el presente trabajo, mostramos que las resonancias de Fano también son posibles en uniones cerradas de fosforeno a lo largo de la dirección en zigzag. La textura especial de pseudoespín de los portadores de carga en la dirección del zigzag permite, a incidencia oblicua, el acoplamiento de estados electrónicos fuera de la barrera electrostática con estados ligados a huecos dentro de ella, dando lugar a una forma asimétrica en la transmisión. Debido a la escala de energía de las barreras electrostáticas en el fosforeno, se requieren barreras ultrafinas para observar el fenómeno de las resonancias tipo Fano. La preservación de la textura del pseudoespín con el cierre de la banda prohibida del fosforeno abre la posibilidad de observar resonancias de Fano en barreras electrostáticas más pequeñas y más anchas. La forma asimétrica de la resonancia de Fano es susceptible al vector de onda transversal, la fuerza y el ancho de la barrera electrostática. Además, la conductancia muestra una marca característica en la posición donde se producen las resonancias Fano. También se abordan las similitudes y diferencias respecto a las resonancias de Fano en grafeno bicapa.

LUNES 05. 12:30-13:00

Magnetorresistencia anómala y polarización perfecta de valles y espín en uniones magnéticas de MoS₂

J.G. Rojas-Briseño, P. Villasana-Mercado, S. Molina-Valdovinos, I. Rodríguez-Vargas

Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas.

jgrojas@uaz.edu.mx

Un dispositivo versátil es aquel que tiene dos estados bien definidos de polarización de valles y espín y una alta respuesta magnetorresistiva, tal como lo hizo D. Wang y colaboradores [1] en siliceno. Siguiendo la idea de la válvula de espín [2], propusieron un sistema asimétrico conformado por un metal ferromagnético (FM) que lo considera la capa dura, un aislante ferromagnético (FI) como la capa blanda y un metal normal (NM) [FM/FI/NM] sobre una capa de siliceno. A través de la modulación de la dirección de la magnetización en las regiones ferromagnéticas lograron obtener dos estados perfectamente bien definidos de polarización de valles y espín así como una alta respuesta magnetorresistiva. En este trabajo, utilizamos una configuración similar a la reportada por Wang, FM/FI/NM, pero sobre una monocapa de MoS₂. Además, consideramos un potencial externo U_0 en la región central de tal forma que los huecos participan en el transporte electrónico, transporte npn. Para este sistema, solo se observó dos estados de polarización con respecto al espín mediante la modulación de las magnetizaciones de las tiras ferromagnéticas. Con respecto a la TMR, obtuvimos una respuesta anómala. Entonces, dado que no pudimos obtener polarización neta en los valles, consideramos ahora un sistema dado como FM/NM/FI, donde también consideramos un U_0 con las mismas características que en caso anterior. Hasta el momento, dos estados bien definidos de polarización de valles se habían reportado tomando en cuenta luz polarizada circular [3, 4]. Para el sistema FM/NM/FI, configurando de manera correcta sus parámetros, logramos encontrar regiones bien definidas de polarización de valles y espín así como valores grandes de TMR.

[1] D. Wang, Z. Huang, Y. Zhang, and G. Jin, Spin-valley filter and tunnel magnetoresistance in asymmetrical silicene magnetic tunnel junctions, *Phys. Rev. B* 93, 195425 (2016).

[2] E. Hirota, H. Sakakima, and K. Inomata, Spin-valve devices, in *Giant Magnetoresistance Devices* (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2002) pp. 71–113.

[3] C. Zhao, J. Ou, W. Lu, and Z. Wen, Perfect spin-valley polarization and magnetoresistance in mos2 tunnel junction with circularly polarized light, *J. J. Appl. Phys.* 61, 080904 (2022).

[4] X.-J. Qiu, Z.-Z. Cao, J. Hou, and C.-Y. Yang, Controlled giant magnetoresistance and spin–valley transport in an asymmetrical MoS₂ tunnel junction, *Appl. Phys. Lett.* 117, 102401 (2020).

LUNES 06. 13:00-13:15

Heteroestructura híbrida a base de crystal fotónico 2d del grupo P4G

Marco A. Tun-Carrillo, Miguel E. Mora-Ramos, Ignacio Perez-Quintana
marcoantonio217@gmail.com

El grupo $p4g$ es una de las clasificaciones posibles en las cuales se puede llenar el plano usando una geometría repetida a lo largo de este. Usando el método de FDTD, Finite Differences in Time Domain, es posible simular un caso simple de una geometría $p4g$ cual si se tratara de un cristal fotónico bidimensional, dicho cristal está conformado por los materiales dieléctricos: óxido de titanio y óxido de silicio. Al rodear la estructura bidimensional por espejos reflectores de Bragg es posible entonces estudiar los fenómenos asociados a las heteroestructuras, como son: modos de transmisión, localización espacial selectiva y la respuesta óptica en base al ángulo de incidencia.

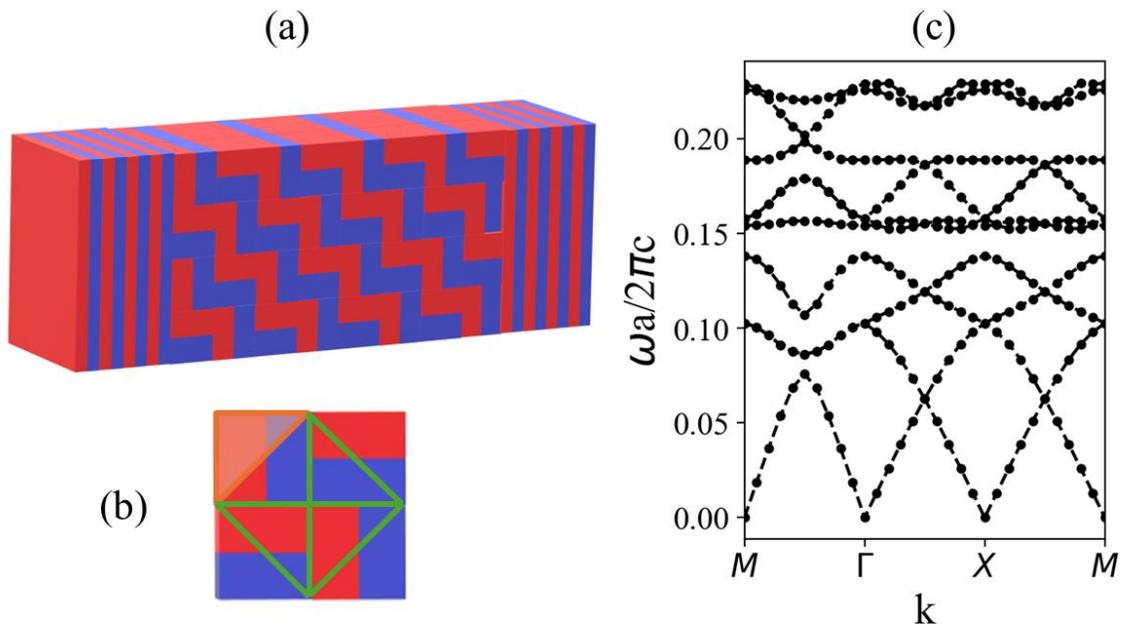


Figure 1. (a) Esquema del sistema híbrido AB-p4g-AB, (b) celda unitaria que conforma la parte bidimensional, (c) Esquema de bandas para el sistema bidimensional.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
LUNES 24. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

LUNES 07. 16:00-17:00 (CONFERENCIA PLENARIA)

Presencia Del Tuneleo de Klein en Redes Ssh Barbudas con una Banda Plana Modificada

Guillermo Monsiváis Galindo, Yonatan Betancur Ocampo
monsi@fisica.unam.mx

Las redes Su-Schrieffer-Heeger (SSH) han sido de gran utilidad para comprender conceptos clave de los aisladores topológicos. En este trabajo estudiamos las propiedades de transmisión de las uniones pn de redes SSH barbudas. El comportamiento de los electrones en estos sistemas se modela mediante partículas masivas con pseudo-espín utilizando un hamiltoniano de Bloch en el marco de la teoría de enlace fuerte. Ajustando las energías de sitio y los parámetros de salto es posible diseñar la estructura de bandas de estas redes. De esta manera, la banda plana, que es característica en los sistemas de pseudo-espín igual a 1, se puede doblar por el potencial escalonado del átomo inferior en el borde barbudo. Así, el objetivo principal de este trabajo es estudiar la transmisión inter-banda desde la banda doblada hasta la de valencia, en donde, dependiendo del valor del parámetro de salto asociado al borde barbudo, se puede producir el tuneleo de Klein.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
LUNES 24. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

LUNES 08. 17:00-17:30

Las propiedades de transporte y termoelectricas en estructuras multi-potenciales autosimilares

M. Miniya¹, L. M. Gaggero-Sager¹, O. Oubram¹, I Rodríguez-Vargas²

¹Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

²Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento 98160, Zacatecas, Zacatecas, México.

mohamminiya@gmail.com

Las estructuras autosimilares representan una novedosa propiedad geométrica para investigar las características de transporte y termoelectricas en el grafeno y otros materiales 2D. En este sentido, hemos desarrollado estructuras autosimilares multi-barreras, donde las características geométricas de estas estructuras se reflejan en la transmitancia, conductancia y coeficiente de Seebeck. Esto evidencia la posibilidad de escalar estas propiedades utilizando reglas específicas de escala

LUNES 09. 17:30-18:00

Deslocalización en superredes desordenadas de grafeno: el efecto dimérico

R. Rodríguez-González¹, H. García-Cervantes², F. J. García-Rodríguez³, Gerardo J. Escalera Santos⁴, and I. Rodríguez-Vargas¹

¹Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento, 98160 Zacatecas, Zacatecas, México.

²Tecnologías Emergentes Industriales e Informáticas, Universidad Tecnológica de León, Blvd. Universidad Tecnológica 225, San Carlos la Roncha, 37670, León, Guanajuato, México.

³Departamento de Ingeniería Mecatrónica, Tecnológico Nacional de México/Instituto Tecnológico de Celaya, Antonio García Cubas Pte #600 Esq, Av. Tecnológico, Celaya, Guanajuato, 38010, México.

⁴Facultad de Ciencias en Física y Matemáticas, Universidad Autónoma de Chiapas, Ciudad Universitaria, Calz. Emiliano Zapata Km. 8, Loma Bonita, 29050, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, México.

rogeliorg@uaz.edu.mx

Las superredes semiconductoras ordenadas y desordenadas representan estructuras con propiedades completamente opuestas. Por ejemplo, las primeras presentan estados extendidos tipo Bloch, mientras que las segundas manifiestan estados localizados. Estas características hacen que la conductancia de las superredes ordenadas sea superior que la conductancia de las superredes desordenadas.

Sorprendentemente superredes desordenadas diméricas semiconductoras, superredes con dos tipos de pozos cuánticos donde uno de los pozos siempre se presenta a pares, presentan estados extendidos [1,2]. El porcentaje de pozos disimiles no necesita ser grande para que se manifiesten efectos de deslocalización (estados extendidos), y además la conductancia resulta ser intermedia entre superredes ordenadas y desordenadas. En este trabajo exploramos el modelo dimérico, desorden correlacionado a corto alcance, en superredes desordenadas en grafeno. Para ello calculamos las propiedades de transmisión y transporte usando la matriz de transferencia y el formalismo de Landauer-Büttiker, respectivamente. Se encuentran y discuten las principales regiones de energía donde la conductancia de las superredes desordenadas diméricas es intermedia a las superredes ordenadas y desordenadas en grafeno. Asimismo, encontramos que las energías resonantes del pozo dimérico se acoplan con las minibandas de energía de la superred dando lugar a estados extendidos no tipo Bloch, en otras palabras, efectos de deslocalización.

- [1] V. Bellani et al., Phys. Rev. Lett. 82, 2159 (1999).
- [2] V. Bellani et al., Physica E 7, 823 (2000)

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
LUNES 24. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

LUNES 10. 18:00-18:30

Relaciones de Kramers-Krönig en modelos de conducción de calor

Angela Camacho de la Rosa, Rolando Pérez Álvarez

Centro de Investigación en Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos
angela.84@ciencias.unam.mx

A partir de la representación del proceso de conducción de calor en sólidos isotrópicos como un fenómeno de respuesta lineal causal, podemos establecer la existencia de la susceptibilidad térmica en el espacio de las frecuencias, que debido a la condición de causalidad en ésta debe satisfacer las relaciones de Kramers-Krönig. A partir del estudio de la tasa de producción de la entropía en el marco de la termodinámica irreversible extendida establecemos como casos de estudio a: la ley de Fourier, la ecuación de Cattaneo-Vernotte y la ecuación de Guyer-Krumhansl. En este trabajo encontramos que la parte real de la susceptibilidad térmica es la encargada del proceso de disipación de la energía térmica, a diferencia de los casos electromagnético y mecánico, en donde es la parte la imaginaria de la susceptibilidad generalizada la encargada del proceso de disipación de la energía. Finalmente discutimos el caso de Guyer-Krumhansl, en donde a la exigencia de causalidad en el modelo de respuesta lineal causal se suma el que la susceptibilidad térmica sea una función dispersiva en las variables espaciales.

**DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
LUNES 24. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA**

LUNES 11. 18:15-18:45

Transporte balístico en superredes aperiódicas en fosforeno

E.J. Guzman¹, O. Navarro¹, O. Oubram², I. Rodríguez-Vargas³

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

²Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

³Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento 98160, Zacatecas, Zacatecas, México.

eric-gio@hotmail.com, jovani.guzman13@gmail.com

Recientemente, los materiales bidimensionales (2D) han sido uno de los focos de investigación debido a sus extraordinarias propiedades físicas y electrónicas, las cuales pueden ser aplicadas en nuevas tecnologías en el campo de la nano-espintrónica [1, 2]. El fosforeno es un material 2D similar al grafeno, pero con diferentes características, tales como una estructura de bandas anisotrópica y un amplio gap de energía (1.52 eV) [3], los cuales se deben a su estructura atómica asimétrica corrugada (puckered). En este trabajo, se investiga el transporte balístico de los portadores de carga (electrones y huecos) en superredes de barreras electrostáticas en secuencias aperiódicas tipo Fibonacci aplicadas sobre una capa de fosforeno [4, 5]. En particular, se calcula la transmisión y la conductancia bajo el formalismo de Landauer-Büttiker [4]. Los resultados muestran la posibilidad de modulación de las propiedades del transporte al variar las dimensiones de las barreras y el número de generación de las secuencias aperiódicas en comparación con el caso de las secuencias periódicas.

Agradecimientos: A CONAHCyT por el apoyo y financiamiento de la estancia de investigación posdoctoral.

[1] Zhao, A., & Wang, B., Two-dimensional graphene-like Xenes as potential topological materials, *APL Materials*, **8**(3) (2020).

[2] Molle, A., Goldberger, J., Houssa, M. et al., Buckled two-dimensional Xene sheets, *Nature Mater* **16**, 163–169 (2017).

- [3] J. M. Pereira Jr., and M. I. Katsnelson, Landau levels of single-layer and bilayer phosphorene, *Phys. Rev. B* **92**, 075437 (2015).
- [4] E.J. Guzmán, O. Oubram, O. Navarro, I. Rodríguez-Vargas, Disorder effects on the ballistic transport of gated phosphorene superlattices, *Phys. Rev. B* **107** (4), 045407 (2023).
- [5] E.J. Guzmán, S. Molina-Valdovinos, O. Oubram, I. Rodríguez-Vargas, Enhancement of the Seebeck coefficient and power factor in gated silicene superlattices induced by aperiodicity, *Journal of Appl. Phys.* **128** (22) (2020).

MARTES 12. 10:00-11:00 (CONFERENCIA PLENARIA)

Metamateriales y metasuperficies multicomponentes

W. Luis Mochán¹ y Guillermo P. Ortiz²

¹Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México

²Departamento de Física, FCENA, Universidad Nacional del Nordeste, Corrientes,
Argentina
mochan@fis.unam.mx

Recientemente hemos desarrollado un formalismo que permite el cálculo del tensor dieléctrico macroscópico $\epsilon_M(k, \omega)$ de sistemas periódicos formados por múltiples componentes con geometrías y composiciones arbitrarias, permitiendo que cada componente sea isotrópica o anisotrópica, dispersiva o no y disipativa o transparente. El formalismo está basado en una extensión del método de Haydock, con el cual construimos una base de funciones en que podemos expandir al campo electromagnético y en la cual el operador de onda puede representarse como una matriz tridiagonal, eficientizando operaciones tales y como la obtención de la función de Green del sistema. A partir de la función de Green podemos obtener la respuesta macroscópica y a partir de su dependencia no local en el vector de onda k podemos obtener los modos fotónicos del sistema, sus propiedades magnéticas y su actividad óptica. Un requisito de la teoría de Haydock es que requiere operadores hermitianos, y en presencia de disipación las funciones respuesta de los materiales no lo son. Sin embargo, hallamos una extensión que nos ha permitido generalizar la metodología a materiales totalmentente arbitrarios. Verificamos este formalismo mediante el estudio de los modos fotónicos de estructuras de Bouligand quirales, para las cuales podemos comparar resultados numéricos con resultados analíticos y lo aplicamos a otros sistemas multicomponentes tales y como metasuperficies plasmónicas.

Agradecemos el apoyo de DGAPA-PAPIIT mediante el proyecto IN109822.

MARTES 13. 11:00-11:30

El efecto Goos-Hänchen para modos vibracionales acústicos y ópticos en una película delgada semiconductor

**Diosdado Villegas¹, Zorayda Lazcano² y Jesús Arriaga², Rolando Pérez Álvarez³,
Fernando de León Pérez⁴**

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

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

³Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas-(IICBA), Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México.

⁴Instituto de Nanociencia y Materiales de Aragón (INMA) and Departamento de Física de la Materia Condensada, CSIC-Universidad de Zaragoza, Zaragoza, España.

diosdado@ifuap.buap.mx

Estudiamos el desplazamiento de Goos-Hänchen (GHS) experimentado por los modos vibracionales acústicos [1] y ópticos reflejados y transmitidos en las superficies de una película semiconductor intercaladas entre dos medios semiinfinitos. Los resultados numéricos muestran que existe una dependencia significativa del GHS del ángulo de incidencia, del tamaño del sistema, la longitud de la onda incidente y del acoplamiento entre los modos vibracionales [1,2]. En particular, para vibraciones acústicas, el GHS puede alcanzar magnitudes de hasta 7 veces más grandes que el espesor de la película y 20 veces la longitud de la onda incidente. En el caso de las vibraciones ópticas, el GHS es más pronunciado, llegando a alcanzar valores que exceden 30 veces la longitud de la onda incidente [2]. Además, es notable poder identificar una pequeña región contenida dentro del espacio de parámetros considerado donde el GHS toma valores negativos para longitudes de ondas más pequeñas que el espesor de la capa semiconductor [2]. Las propiedades de los modos vibracionales estudiadas en este trabajo podrían ser de importancia para investigaciones futuras relacionadas con el transporte de fonones en heteroestructuras semiconductoras.

[1] L. Fa, L. Xue, Y. Fa, Y. Han, Y. Zhang, H. Cheng, P. Ding, G. Li, S. Tang, C. Bai, B. Xi, X. Zhang, and M. Zhao: “Acoustic Goos-Hänchen effect”, *Science China Physics, Mechanics and Astronomy* **10**, 104311 (2017).

- [2] D. Villegas, J. Arriaga, F. de Leon-Pérez, and R. Pérez-Álvarez: “Goos-Hänchen effect for optical vibrational modes in a semiconductor structure”, *J. Phys.: Condens. Matter* 29, 125301 (2017).
- [3] D. Villegas, Z. Lazcano, J. Arriaga, R. Pérez-Álvarez and F. de Leon-Pérez: “Goos-Hänchen shift for coupled vibrational modes in a semiconductor structure”, *J. Phys.: Condens. Matter* (2024).

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
Martes 25. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

MARTES 14. 11:30-12:00

Síntesis Y Caracterización de Perovskitas Dobles y Simples

Tania Elizabeth Soto Guzmán

Centro de Investigaciones Químicas (CIQ), Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa
Cuernavaca Morelos C.P. 62209

tania.soto@uaem.mx

Los óxidos medio metálicos, con estructura de doble perovskita son compuestos con gran potencial de aplicación en espintrónica. Esto se atribuye a las propiedades particulares del sistema $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ (SFMO), las cuales han sido ampliamente estudiadas, entre ellas la polarización de spín, la magnetorresistencia a bajo campo y su alta temperatura de Curie (TC). Esta última es susceptible de ser modificada con el aumento de electrones itinerantes en el nivel de Fermi, para ello, los elementos lantánidos son excelentes opciones por tener 3 electrones en su capa de valencia. En el presente trabajo se realiza la síntesis del mencionado sistema dopado con elementos trivalentes, considerando el dopaje estequiométrico, es decir ajustando la cantidad de Fe y Mo de modo que se mantenga la neutralidad de la carga en el compuesto.

Por otra parte, los óxidos perovskita con fórmula ABX_3 son compuestos con gran relevancia en estado sólido, debido al gran número de aplicaciones. Las perovskitas inorgánicas simples están compuestas estequiométricamente por cationes en el sitio A y B y X es un anión. Entre sus aplicaciones están: catálisis, celdas de combustible sólido, catalizadores efectivos para la oxidación total de COV (compuestos orgánicos volátiles) piezo-ferro-electricidad, separadores de gas, cátodos en pilas de combustible de óxido sólido, aplicaciones de monitoreo ambiental, materiales magnéticos, superconducción, etc. Idealmente las perovskitas simples, presentan estructura cristalográfica cúbica, sin embargo al cambiar los cationes surge distorsión estructural lo que ocasiona que la estructura cristalográfica reforme a ortorrómbica o tetragonal. En el presente trabajo, se realiza la síntesis de las perovskitas simples AFeO_3 (A=La) con dopajes (Nd y Pr) con la finalidad de estudiar sus propiedades morfológicas, estructurales y magnéticas al realizar el dopaje.

MARTES 15. 12:00-12:15

**Prediction of the photovoltaic performance of the lead-free layered
Ruddlesden–Popper organic-inorganic perovskite (CH₃NH₃)₂GeI₄**

Khaoula Ouassoul

Faculty of Sciences, Mohammed V University of Rabat, Morocco.

ouassoulkhaoula@gmail.com

Using density functional theory (DFT) and the spectral limited maximum efficiency (SLME) model, we thoroughly evaluate the material MA₂GeI₄ as a prospective absorber for photovoltaic applications. This material belongs to the family of layered material organic-inorganic Ruddlesden Popper perovskites, which have attracted interest due to their stability. Our first-principles calculations show that MA₂GeI₄ has a direct bandgap that is suitable for light absorption at 1.37 eV.

To understand the source of its exceptional optical properties, the electronic structure, density of states, and optical properties were examined. Also, we used the SLME model to estimate the high limit for MA₂GeI₄ solar cell efficiency. The latter was found to be about 32.6% power conversion efficiency.

The material's excellent absorption and promising photovoltaic properties contribute to its high efficiency, even when quantum confinement occurs between layers. We found that MA₂GeI₄ is a potential absorber material for solar applications, demonstrating both good absorption characteristics and advantageous electrical properties. This discovery lays the path for additional experimental investigation of MA₂GeI₄ based solar cell.

MARTES 16. 12:15-12:30

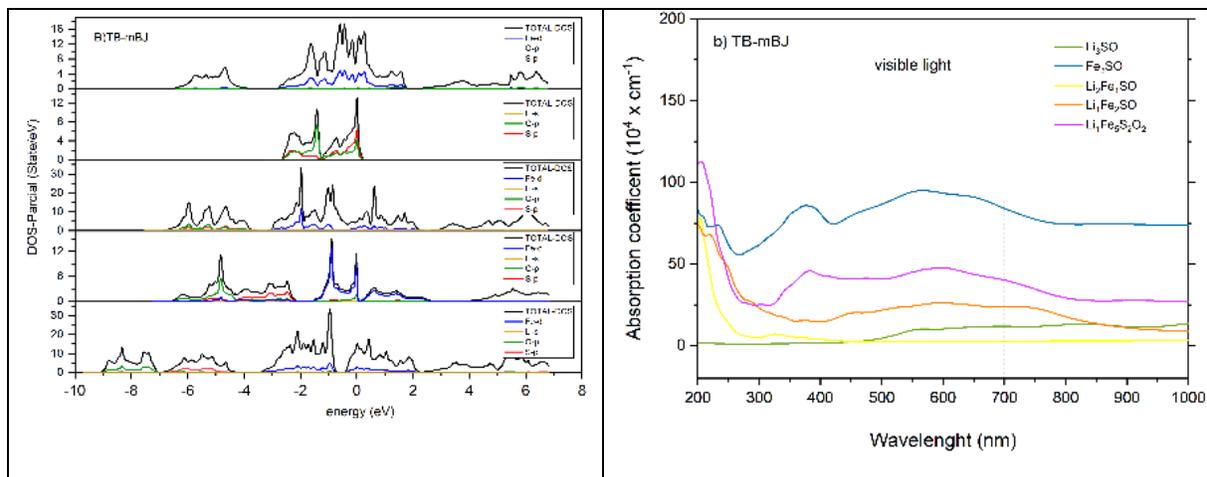
Estudios ab-initio de la antiperovskita (LiFe)₃SO para el uso de almacenamiento de energía

Eduardo Azael Hoy Canul¹, Joana Xool Aban¹, Zakaryaa Zarhri²

¹ Tecnológico Nacional de México/I. T. de Chetumal, Av. Insurgentes 330, 77013 Chetumal, Q. Roo, Mexico

² CONACYT-Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM), Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, C.P. 62209, Cuernavaca, Morelos, Mexico
z.zarhri@gmail.com

La teoría del funcional de la densidad (DFT) junto con el software Wien2k son herramientas utilizadas para estudiar las propiedades físicas de la antiperovskita Fe₃SO modificada por cambio atómico con Li. con el objetivo comprender, a nivel electrónico y molecular, el comportamiento electroquímico del material dopado y optimizar su rendimiento en aplicaciones prácticas de almacenamiento y aprovechamiento de la energía. Esta investigación se realizó utilizando el método de Ondas Planas Linealizadas Aumentadas (LAPW) para el análisis de la estructura electrónica de la antiperovskita (Li-Fe)₃SO. El análisis de la densidad de estados demuestra mejoramiento en la capacidad de almacenamiento de litio del material dopado, así como sobre la estabilidad y la capacidad de transporte de carga del electrodo. De igual manera, la presencia de picos de absorbancia en energías cercanas a los niveles de energía de la batería de litio puede indicar una alta capacidad de almacenamiento de litio en el material, lo que hace de este material deseable para su aplicación en baterías.



[1] K. T. Lai, I. Antonyshyn, Y. Prots, y M. Valldor, «Anti -Perovskite Li-Battery Cathode Materials», J. Am. Chem. Soc., vol. 139, n.º 28, pp. 9645-9649, jul. 2017, doi: 10.1021/jacs.7b04444.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
Martes 25. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

MARTES 17. 12:30-13:00

Enfoque de puntos especiales para el cálculo del coeficiente de absorción óptica en películas de puntos cuánticos de perovskita

Carlos I. Cabrera¹, Rolando Pérez-Álvarez²

¹Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, 98160 Zacatecas, Zac., México

²Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 62209, Cuernavaca, Morelos, México

carlos.cabrera@uaz.edu.mx

Los puntos cuánticos de perovskita totalmente inorgánicos con la forma cúbica habitual han surgido como una alternativa exitosa y de bajo costo a los nanomateriales electrónicamente funcionales que motivan diversos campos de aplicaciones, incluida la energía fotovoltaica de alta eficiencia. Aquí presentamos un enfoque eficiente y casi analítico para el cálculo del coeficiente de absorción óptica en películas de puntos cuánticos de perovskita autoensambladas. El enfoque aprovecha la técnica de puntos especiales para la integración sobre la zona bidimensional de Brillouin, lo que minimiza el costo computacional. Se calcula el espectro de absorción óptica para películas de puntos cuánticos de éster metílico del ácido fenil-C60-butírico (PCBM)/CsPbI₃, en buena concordancia con el experimento suponiendo un ancho de línea homogéneo de 50 meV y considerando un conjunto de diez puntos especiales. Mostramos que la absorción de la luz en estos sistemas es una propiedad optoelectrónica cooperativa resultante del acoplamiento mecánico-cuántico entre nanocubos de perovskita, lo que conduce a estados extendidos de sistema. La generalidad de este enfoque lo hace adecuado para calcular el coeficiente de absorción óptica en una amplia clase de sistemas de puntos cuánticos de perovskita.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
Martes 25. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

MARTES 18. 16:00-16:30

**Fragment-Asperity Interaction Model (scp) Model Reproduces Q-Values
of Occurring Seisms**

Oscar Sotolongo Costa

Centro de Investigación en Ciencias CInC, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
Cuernavaca Morelos México.

osotolongo@gmail.com

The fragment- asperity interaction model was elaborated taking into account the fragment size distribution function between tectonic plates. These fragments were postulated to take into account the huge interactions that produce motions into the Earth crust which liberate energy as earthquakes. The key assumption of the model was the inclusion of the Gouge as an active agent, into a displacement of tectonic plates. In this talk it is shown that the polemic “q” parameter of Tsallis entropy is an emergent quantity from the theory that determines the measured energy of earthquakes in all catalogues we have processed. The q value for all earthquakes is not a simple fitting constant but determines the rank of values on which the entropy variation is sharper. Seism forecasting is discussed in this case.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
Martes 25. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

MARTES 19. 16:30-17:00

Autómatas Celulares para la Simulación y Optimización de Emisiones y Flujo de Tráfico en Sistemas de Dos Rutas

Rachid Marzoug¹, Beatriz Castillo Téllez², Gerardo Alberto Mejía Pérez², Carlos Vega Jesahel³, Margarita Castillo Téllez⁴

¹ Centro Universitario del Norte, Universidad de Guadalajara, Colotlán, Jalisco.

² Centro Universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara, Tonalá, Jalisco

³ Centro Universitario de Tlajomulco, Universidad de Guadalajara, Tlajomulco, Jalisco.

⁴ Facultad de ingeniería, Universidad Autónoma de Campeche, Campeche.

rachid.marzoug@academicos.udg.mx

Este estudio utiliza el modelo de Autómatas Celulares para modelar y optimizar las emisiones y el flujo de tráfico en sistemas de dos rutas mediante estrategias de retroalimentación de información. Se revela que la Estrategia de Retroalimentación del Número de Vehículos (VNFS) es la más efectiva para reducir las emisiones de CO₂.

Palabras clave: Autómatas Celulares, Emisiones CO₂, Sistemas de Dos Rutas, Flujo, estrategias de retroalimentación de información

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
Martes 25. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

MARTES 20. 17:00-17:30

Desorden estructural en el delta dopado

Humberto Noverola Gamas¹, Outmane Oubram², Luis Manuel Gaggero Sager³, Eddy Rabanales Márquez^{1,2}

¹División Académica de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco. Cunduacán Tabasco México.

²Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Cuernavaca Morelos México.

³Centro de Investigación en Ingenierías y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Cuernavaca Morelos México.

noverola86@gmail.com

Dentro de los sistemas de gran relevancia en la física de semiconductores se encuentran los pozos cuánticos delta-dopados. Estos se fabrican al dopar un semiconductor con otro elemento en una capa bidimensional de ancho atómico. En el marco de la teoría de Thomas-Fermi, hemos determinado la estructura electrónica de un sistema con dopaje tipo delta en GaAs. En particular, hemos estudiado las propiedades ópticas no lineales de este sistema con dopaje tipo n [1,2]. Al introducir un parámetro asociado al desorden estructural del sistema, la geometría del perfil de potencial cambia, lo que origina diferentes valores para las autoenergías y funciones propias, ejerciendo efectos significativos en el coeficiente de absorción óptico. Es importante mencionar que nuestros resultados son relevantes para la síntesis y caracterización de dispositivos semiconductores con el dopaje característico tipo delta.

[1] Noverola-Gamas H, Gaggero-Sager LM, Oubram O. Optical absorption coefficient in n -type double δ -doped layers GaAs quantum wells. *Int. J. Mod. Phys. B.* 2019; **33**: 1950215.

[2] Noverola-Gamas H, Gaggero-Sager LM, Oubram O. Interlayer distance effects on absorption coefficient and refraction index change in p-type double- δ -doped GaAs quantum wells. *Chin. Phys. B* 2019; **28**, 124207

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
LUNES 24. SESIÓN DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

MARTES 21. 17:30-17:45

Caminos de corriente atómicamente finos en grafeno Kekulé-O

Santiago Galván y García, Thomas Stegmann, Yonatan Betancur Ocampo y Francisco Sánchez Ochoa.

Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, 62210
Cuernavaca, Mexico

santiagogyg@icf.unam.mx, stegmann@icf.unam.mx

Demostramos que el flujo de corriente en grafeno puede ser manipulado en caminos atómicamente delgados mediante ingeniería de distorsiones Kekulé-O. Una frontera de grano separa al sistema en dos regiones topológicas distintas de Kekulé-O e induce un estado de pared de dominio balístico. El estado es independiente de la orientación de la frontera de grano respecto a las subredes de grafeno y permite guiar la corriente en caminos diseñados. Este estado presenta una brecha de banda prohibida, por lo que puede ser manipulado con un potencial de compuerta. Nuestros resultados son explicados por una generalización del modelo de Jackiw-Rebbi, donde los electrones en una región del sistema se comportan como Fermiones con masa efectiva compleja. Demostramos que se puede realizar este sistema mediante cálculos DFT, decorando el sistema con átomos de Ti.

MARTES 25 DE JUNIO. SESIÓN DE LOS CARTELES

TÍTULOS Y RESÚMENES DE LOS CARTELES

Poster 01- Efecto de la aperiodicidad en las propiedades de transmisión y transporte en superredes basadas en bicapa de grafeno: El caso Fibonacci

J. A. Briones-Torres¹, R. Rodríguez-González², R. Pérez-Álvarez³, S. Molina-Valdovinos², I. Rodríguez-Vargas²

¹Universidad de La Ciénega del Estado de Michoacán de Ocampo, Ingeniería en Nanotecnología, Avenida Universidad 3000, Col. Lomas de la Universidad 59103, Sahuayo, Michoacán, México.

²Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento, 98160, Zacatecas, Zacatecas, México.

³Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Centro de Investigación en Ciencias, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa 62209, Cuernavaca, Morelos, México.
jabriones@ucemich.edu.mx

En el presente trabajo estudiamos las propiedades de transmisión y transporte en superredes tipo Fibonacci basadas en bicapa de grafeno, particularmente se presentan los cálculos para contornos de energía y conductancia bajo la variación de los diferentes parámetros de la superred como el número de generación y altos y anchos de barrera. El objetivo principal es buscar regiones con cambios significativos para el cálculo de los coeficientes del transporte como la función conductancia y coeficientes relacionados al Seebeck y factor de potencia, con la finalidad de encontrar los parámetros adecuados para la mejora de la figura de mérito. Para la obtención de la transmitancia y conductancia; así como de los coeficientes del transporte se implementó el método de la matriz híbrida y el formalismo de Sturm-Liouville.

Palabras clave: Bicapa de grafeno, Superredes, Fibonacci, Transporte.

Poster 02- Algoritmo diferencias finitas en Python para calcular estructura electrónica de pozos cuánticos

Eddy Rabanales Márquez^{1,2}, Humberto Noverola Gamas², Outmane Oubram¹

¹Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, 62209, Cuernavaca, Morelos

²División Académica de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco. Cunduacán Tabasco México.
eddy.rabanales@ujat.mx

La ecuación de Schrödinger estacionaria unidimensional es una herramienta fundamental en la física cuántica para describir el comportamiento de electrones confinados dentro de un pozo potencial[1]. En particular, la solución de la ecuación de Schrödinger estacionaria unidimensional requiere de métodos numéricos eficientes y precisos para su resolución[2]. Debido a los retos numéricos que representa resolver una ecuación diferencial de segundo orden en el contexto de un pozo cuántico, se han aplicado diversas estrategias algorítmicas para obtener los niveles de energía y las ecuaciones de onda, tales como métodos numéricos deterministas, algoritmos genéticos y algoritmos estadísticos[3]; sin embargo, aún quedan áreas de oportunidad para conseguir un algoritmo que tenga buen desempeño, alta precisión y sencillez en su implementación.

La aproximación de la segunda derivada por diferencias finitas es un método simple de implementar[4] y ha demostrado ser efectiva para abordar la resolución de la ecuación de Schrödinger[5], tal y como lo muestra el trabajo de Sullyvan [6] y Halpern [5].

En este trabajo se propone aplicar una estrategia de discretización de la ecuación de Schrödinger con el fin de aproximar la segunda derivada por medio de una diferencia finita central, seguida de una representación matricial y finalmente su diagonalización para obtener los autovalores y autofunciones de un pozo cuántico. Esta estrategia cumple la condición de ser algorítmicamente sencilla sin perder precisión en los resultados. Se mostrará la aplicación de esta técnica a 3 casos de pozos cuánticos.

[1] I. W. Sudiarta y D. J. W. Geldart, «Solving the Schrödinger equation using the finite difference time domain method», *J. Phys. Math. Theor.*, vol. 40, n.º 8, p. 1885, feb. 2007, doi: 10.1088/1751-8113/40/8/013.

[2] A. Keshavarz y N. Zamani, «Optimization of optical absorption coefficient in asymmetric double rectangular quantum wells by PSO algorithm», *Opt. Commun.*, vol. 294, pp. 401-404, may 2013, doi: 10.1016/j.optcom.2012.12.039.

[3] J. Tilly *et al.*, «The Variational Quantum Eigensolver: A review of methods and best practices», *Phys. Rep.*, vol. 986, pp. 1-128, nov. 2022, doi: 10.1016/j.physrep.2022.08.003.

[4] J. D. Cooper, A. Valavanis, Z. Ikonić, P. Harrison, y J. E. Cunningham, «Finite difference method for solving the Schrödinger equation with band nonparabolicity in mid-

infrared quantum cascade lasers», *J. Appl. Phys.*, vol. 108, n.º 11, p. 113109, dic. 2010, doi: 10.1063/1.3512981.

[5] A. M. Halpern, Y. Ge, y E. D. Glendening, «Visualizing Solutions of the One-Dimensional Schrödinger Equation Using a Finite Difference Method», *J. Chem. Educ.*, vol. 99, n.º 8, pp. 3053-3060, ago. 2022, doi: 10.1021/acs.jchemed.2c00557.

[6] D. M. Sullivan y D. S. Citrin, «Determination of the eigenfunctions of arbitrary nanostructures using time domain simulation», *J. Appl. Phys.*, vol. 91, n.º 5, pp. 3219-3226, mar. 2002, doi: 10.1063/1.1445277.

Poster 03- Propiedades termoeléctricas y de transporte electrónico en superredes de germaneno

Brian Daniel Gutiérrez Reyna¹, Outmane Oubram¹, Zakaryaa Zarhri², Eric Jovani Guzmán³

¹ Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, México

² CONACYT-Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM), Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, C.P. 62209, Cuernavaca, Morelos, México

³ Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. Ex Hacienda de San José de La Huerta, 58190 Morelia, Michoacán, México

brian.gutierrez@uaem.edu.mx

Se reconoce ampliamente que el rendimiento y la eficiencia de los dispositivos termoeléctricos podrían mejorarse con materiales de baja dimensión. En este trabajo, hemos explorado el germaneno, un material bidimensional, a través de arreglos periódicos y aperiódicos de electrodos. Las nanoestructuras termoeléctricas se describen mediante un Hamiltoniano efectivo de baja energía alrededor del punto de Dirac. La transmisión, conductancia y el coeficiente Seebeck se han determinado utilizando el método de la matriz de transferencia, el formalismo de Landauer-Büttiker y la relación de Cutler-Mott, respectivamente. Hemos encontrado que el arreglo de superred aperiódico resulta en una mejora del coeficiente Seebeck y del factor termoeléctrico en comparación con los arreglos periódicos a lo largo de los cuatro canales de conducción. Además, nuestros hallazgos revelan que un aumento en la oscilación con el número de barreras electrostáticas conduce a una disminución en la conductancia, pero mejora el coeficiente Seebeck para ambos arreglos. Los resultados de esta investigación no solo mejorarán nuestra comprensión de las propiedades del germaneno, sino que también identificarán aplicaciones potenciales en dispositivos termoeléctricos novedosos y más eficientes, proporcionando nuevas perspectivas para estudios futuros.

Poster 04- Diseño de Prototipo para la Captación de Agua Atmosférica por Medio de Celdas Peltier

Yair Alejandro Gutiérrez Álvarez¹, Roy López Sesenes¹, Outmane Oubram¹, Hugo Albeiro Saldarriaga Noreña²

¹Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, 62209, Cuernavaca, Morelos.

²Centro de investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, 62209, Cuernavaca, Morelos.

yair.gutierrez@uaem.edu.mx

La escasez del agua es un problema grave a escala mundial que afecta a gran parte de la población, algunos de los factores por lo cual la población no tiene acceso a este vital líquido son por diferentes causas, algunas de ellas son: causas meteorológicas, la contaminación, el deterioro de los ecosistemas, el aumento poblacional, la privatización y la falta de infraestructura [1]. El cálculo más reciente del balance hídrico de México señala que recibe un volumen anual promedio de 1,449 km³ de agua de precipitación, de los cuales 70% regresa a la atmósfera por evapotranspiración [2], El estudio de captación agua atmosférica por medio de sistemas termoeléctricos tiene una gran oportunidad de investigación y desarrollo de nuevas tecnologías.

El objetivo esta investigación es buscar una alternativa sustentable para la captación de agua atmosférica y poder mitigar la escasez de agua en zonas donde no se tiene la infraestructura necesaria para la distribución de este vital líquido,aprovechando condiciones ambientales como la temperatura ambiente, y la humedad relativa del aire, es por eso que se ha diseñado un prototipo para la captación de agua atmosférica, que permite alcanzar el punto de rocío dentro del sistema, a través de la condensación a partir del control de temperatura generada por celdas Peltier y un flujo constate de entrada de aire, logrando así la condensación en un disipador de calor generando un goteo constante.



	Hora de inicio	Hora final
Fecha	07/06/2023	07/06/2023
Hora	14:12:25	15:12:02
Temperatura celda Peltier(°C)	7.25	9.38
Temperatura 1 Parte superior(°C)	27.5	28.37
Temperatura 2 Parte inferior (°C)	28.44	28.55
Temperatura ambiente (°C)	27.9	27.6
Humedad relativa (%)	57	61
Temperatura promedio (°C)	27.96	28.19
Temperatura punto de rocío(°C)	18.6	19.99

Figura 1. Prototipo realizado. Tabla 1. Datos adquiridos

Una vez teniendo el prototipo construido (Figura 1), se realizó una prueba en el siguiente horario de 0:19 am a 1:19 am. Para la prueba realizada se tomaron 720 mediciones cada 4 segundos y se guardaron de forma automática en una memoria SD. Los datos adquiridos resumidos se muestran en la Tabla 1. En esta prueba se obtuvo como resultado una captación de agua de 15 ml en un tiempo de una hora, con una temperatura ambiente promedio de 30.28 °C y 28.91 °C y una humedad relativa entre 45% y 47%, teniendo estos valores, la programación dentro de la placa Arduino realizó el cálculo correspondiente para conocer la temperatura necesaria para alcanzar el punto de rocío dentro del sistema, la cual tuvo una variación entre 17 °C y 17.3°C, respecto con la temperatura del sistema de enfriamiento del prototipo.

[1] Esparza, M. (2014). La sequía y la escasez de agua en México: Situación actual y perspectivas futuras. *Secuencia*, (89), 193-219.

[2] Martínez Austria, P. F., Díaz-Delgado, C., & Moeller-Chavez, G. (2019). Seguridad hídrica en México: diagnóstico general y desafíos principales. *Ingeniería del agua*, 23(2), 107-121

Poster 05- Predicción de los accidentes en una intersección mediante modelado de autómatas celulares y machine learning

Pablo Humberto Hernández Peralta¹, Rachid Marzoug², Outmane Oubram¹

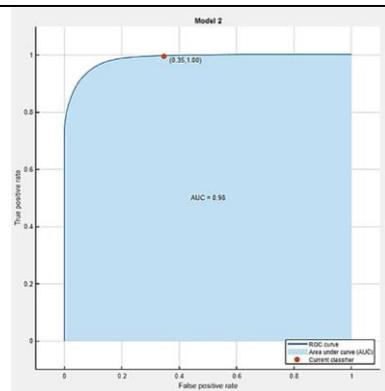
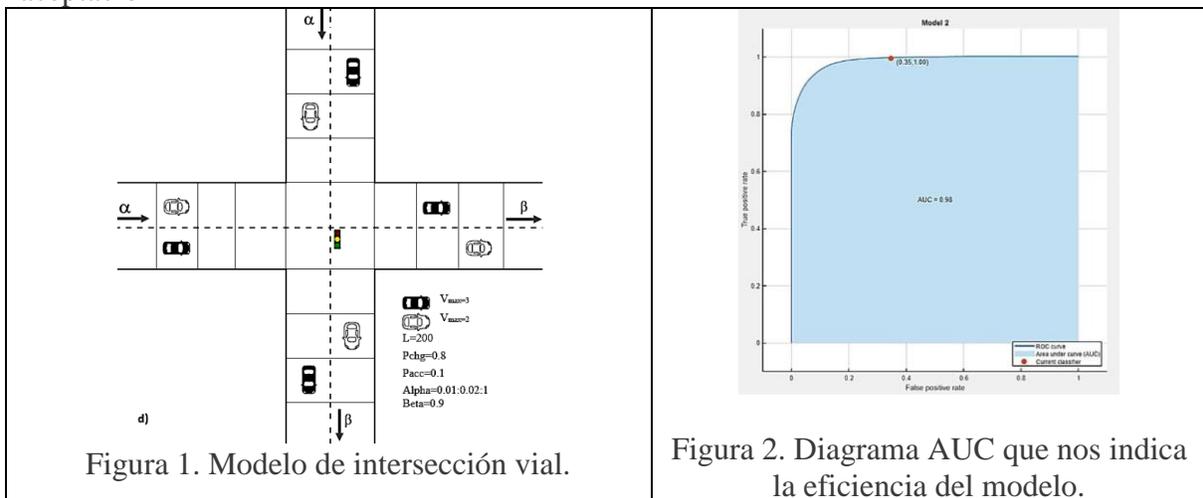
¹Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, 62209, Cuernavaca, Morelos.

²Centro Universitario del Norte, Universidad De Guadalajara, Carretera Federal No. 23, Km 191, 46200, Colotlán, Jalisco.

pablo.hernandez@uaem.edu.mx

El sistema de transporte es un sistema complejo compuesto por carreteras, vehículos, intersecciones, semáforos, peatones, conductores, etc. En las últimas décadas en este sistema se ha observado un incremento en el uso de vehículos de transporte, desde entornos rurales hasta grandes ciudades. En México el sector de transporte ocupa el primer lugar en consumo energético con el 38.44% revela el Balance Nacional De Energía [1]. Actualmente, en el mundo hay 16.5 millones de autos eléctricos [2]. No obstante, ha sido insuficiente para disminuir la dependencia de las energías no renovables. Además del impacto que ocasiona, el sector que más energía consume da como resultado que el 25% de las emisiones de gases efecto invernadero provenga del sector transporte [3], colocándolo en primer lugar como emisora contaminante. El modelado de la simulación se considera como herramienta computacional para estudiar y analizar los diferentes fenómenos relacionados con tráfico vehicular con el fin de encontrar soluciones.

El objetivo de este proyecto consiste en realizar un modelo de tráfico vial en una intersección señalizada mediante la herramienta de autómatas celulares, donde se logren obtener datos de variables como accidentes, flujo, densidad, velocidad, distancia entre vehículos, etc. En cada sección del modelo el cual se observa en la figura 1. Posteriormente al adquirir los datos suficientes de esta simulación podremos echar mano de los algoritmos de machine learning específicamente el de K vecinos más cercanos (KNN) para realizar una predicción y clasificación de los accidentes vehiculares. En la figura 2 se observa el diagrama AUC donde nos indica la eficiencia de clasificación del modelo con 98% de aceptación



- [1] SENER, S. d. (2020). Balance Nacional De Energia de 2020. Ciudad de México.
- [2] Agency, I. E. (2022). International Energy Agency. Obtenido de <https://www.iea.org/>
- [3] SEMARNAT, S. d. (2018). Inventario Nacional de Emisiones de Gases Y Compuestos De Efecto Invernadero 1990-2015. Ciudad de México.

Poster 06- Simulación y Modelado de Red Neuronal Artificial para Hacer Eficiente Dispositivo en la Captación de Agua a Partir de la Atmósfera

¹Alexis Ángeles Robles, Yair Alejandro Gutiérrez Álvarez², Roy López Sesenes², Outmane Oubram²

¹Facultad de contaduría administración e informática, Universidad Autónoma de Morelos

²Facultad de ciencias químicas e ingeniería, Universidad Autónoma de Morelos

alexis.angeles0160@gmail.com

El presente proyecto tiene como objetivo la predicción del punto de rocío con ayuda de redes neuronales artificiales y regresión lineal. Las bases de datos son recabadas de diferentes sensores que monitorean el comportamiento del dispositivo durante el mismo se encuentra en funcionamiento. Así mismo se menciona que se remplazan algunos sensores que miden la temperatura de diferentes puntos del prototipo, por una cámara térmica, la cual hace eficiente la captura de información del interior del dispositivo.

Una vez obtenida una red neuronal funcional y con un margen de error pequeño se procede a realizar el análisis de sensibilidad, para obtener los pesos más significativos de la red neuronal artificial, con la finalidad de poder controlar algunas variables que influyen en la captación de agua, todo ello para poder captar más agua con menos recursos.

Con técnicas de machine learning, podemos hacer un modelo para clasificar información en este caso se utilizan Maquinas de Soporte Vectorial y Arboles de Decisión. Se toma como pauta el valor de la humedad en el ambiente para determinar si el resultado del punto de rocío es eficiente o deficiente, en la captación de agua. A continuación, se muestran algunos resultados obtenidos durante la ejecución.

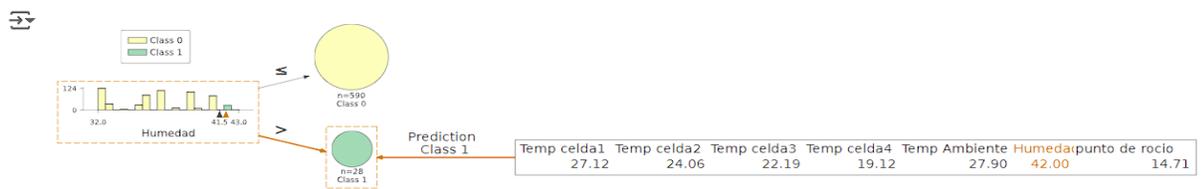
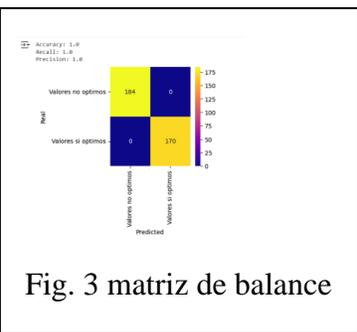
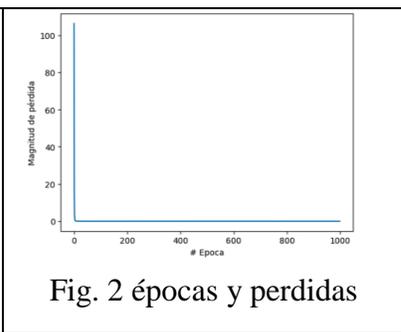
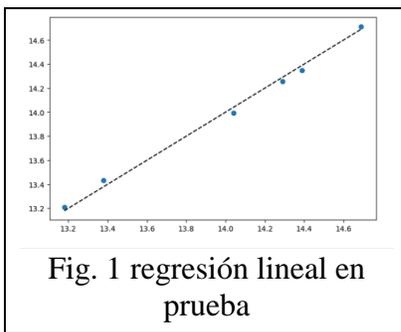


Fig. 4 árbol de decisión

Poster 07- Cristales Fotónicos Quirales

Andrea López Reyna¹ y Wolf Luis Mochán Backal²

¹Centro de Investigación en Ciencias, UAEMor

²Instituto de Ciencias Físicas, UNAM

andrea.lopez@uaem.edu.mx

Las estructuras quirales son configuraciones tridimensionales, por ejemplo con forma helicoidal o de espiral, que se caracterizan por no tener ningún plano de simetría en espejo. Debido a la asimetría de la estructura, interactúa de manera distinta con luz polarizada circularmente que gira en sentido horario y con luz que gira en sentido antihorario. Realizar pequeñas modificaciones en la configuración quiral de la estructura puede causar un efecto significativo en sus propiedades ópticas, lo cual resulta de interés para la creación y diseño de materiales ópticos con propiedades ópticas específicas.

Existen cristales fotónicos naturales, por ejemplo la estructura de Bouligand, que consiste en un sistema multicapa presente en la cutícula de algunos artrópodos. Se trata de un sistema quiral, cuyas capas sucesivas se disponen con orientaciones distintas, gradualmente rotadas. Presenta propiedades ópticas similares a las de los cristales fotónicos, lo cual resulta en la formación de bandas de energía permitidas y brechas prohibidas en la relación de dispersión de los fotones. Empleando matrices de rotación se generalizó la matriz de transferencia de películas anisotrópicas en ejes principales, similares a las de medios isotrópicos, a películas orientadas arbitrariamente. Mediante la multiplicación sucesiva de matrices rotadas, que representan a cada capa, se obtuvo la matriz de transferencia de un periodo de la estructura de Bouligand. Empleando esta matriz, el teorema de Bloch condujo a la relación de dispersión, que se exploró de manera numérica y se verificó mediante una formulación analítica alternativa basada en la ecuación de onda en el interior de un sistema con una función dieléctrica helicoidal. Con esta matriz de transferencia se calcularon propiedades ópticas como la relación de dispersión fotónica y la polarización.

[1] Y. Bouligand. (1972). Twisted fibrous arrangements in biological materials and cholesteric mesophases. *Tissue and Cell*.

[2] Anisotropic optical response of arthropods's cuticle, L.A.Rodríguez, H.C.Achitte Schmutzler, M.I. Dufek, Guillermo P. Ortiz, W. Luis Mochán, *Óptica Pura y Aplicada* 56 (2023) 51131. <https://doi.org/10.7149/OPA.56.2.51131>.

Poster 08- Guante electrónico para la traducción de algunas señas de la Lengua de Señas Mexicana (LSM) a texto y audio

A. Mariel-Roa¹, F. Alonso-Pecina¹, J. Hernández¹, P. Moreno-Bernal¹, O. Oubram²

¹ Facultad de Contaduría Administración e Informática, Universidad Autónoma de Morelos

² Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, México
armando.mariel@uaem.edu.mx

La comunicación es un aspecto fundamental en la vida cotidiana, y para aquellos que utilizan la Lengua de Señas Mexicana (LSM) como medio de comunicación primario, acceder a la información y expresarse plenamente puede ser un desafío en entornos donde el lenguaje auditivo es predominante. En México, aproximadamente 2.3 millones de personas padecen discapacidad auditiva, de las cuales más de 50% son mayores de 60 años; poco más de 34% tienen entre 30 y 59 años y cerca de 2% son niñas y niños. Con el objetivo de facilitar la comunicación y promover la inclusión, presentamos el desarrollo de un guante inteligente traductor de la lengua de señas mexicana. Se pretende desarrollar un guante inteligente que traduzca algunos gestos de la LSM a texto o voz en tiempo real, utilizando sensores flexibles y un acelerómetro, para mejorar la comunicación y la accesibilidad de las personas con discapacidad auditiva.

Poster 09- Análisis de la transferencia de carga eléctrica entre circuitos de 23 kV, en las RGD de la ciudad de Cuernavaca, como implicación material

Luis Cisneros Villalobos, **Luis Edgar Lira Toral**

^a Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, México

La transferencia de carga ininterrumpida entre circuitos de eléctricos de distribución, en las Redes Generales de Distribución (RGD) de la ciudad de Cuernavaca, es una cualidad operativa que se debe adoptar para disminuir las interrupciones de energía causadas por las maniobras realizadas por el suministrador de energía.

Analizar y proponer la implementación de un procedimiento de transferencia de carga ininterrumpida entre circuitos de distribución provenientes de distintas fuentes de energía, en las RGD de la ciudad de Cuernavaca, es plausible con base en los principios de sincronización entre dos circuitos eléctricos, los cuales, se fundamentan en: un mismo nivel de tensión eléctrica, misma frecuencia, mismo número de fases, el desplazamiento angular entre fases, así como una misma secuencia de fases, tales condiciones, permiten la puesta en paralelo o sincronización momentánea de dos circuitos de distribución, sin distinción de su fuente de energía, para poder realizar maniobras de transferencia de carga entre ellos, evitando optar por interrumpir energía en uno de los circuitos a sincronizar para que el otro circuito pueda tomar la carga eléctrica interrumpida debido a una discrepancia entre las variables eléctricas -implicaciones materiales- involucradas para una correcta sincronización entre circuitos de 23 kV.

Uno de los resultados y objetivos de disminuir las interrupciones de energía en las RGD de 23 kV, es contribuir a garantizar la operación continua, eficiente y segura en beneficio de los usuarios, así como el cumplimiento de las obligaciones de servicio público y universal [...]». Establecida en (LIE, art.- 1).

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

MARTES 01. 9:00-10:00. (CONFERENCIA PLENARIA)

El despliegue de la energía fotovoltaica; Tecnología de celdas solares

Yasuhiro Matsumoto

Departamento de Ingeniería Eléctrica

Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, México.

e-mail: ymatsumo@cinvestav.mx

Para la transición energética hacia 2050, se requiere de fuentes sin emisiones de carbono. México cuenta con un abundante recurso solar y según estudio de la Agencia Internacional de Energías Renovables (IRENA), el costo medio ponderado de la electricidad fotovoltaica mundial en 2022 (sin almacenamiento), ha caído a 4.9 centavos de dólar por kW-hora (o aprox. \$0.85 pesos), y que ahora está por debajo de las opciones fósiles de menor costo.

Los sistemas fotovoltaicos es una de las tecnologías de energía limpia más importantes. Es un sistema seguro y confiable con un bajo costo de mantenimiento sin emisiones contaminantes en el sitio. La energía fotovoltaica conectada a la red eléctrica aumenta rápidamente y el mercado global alcanzó los 100 GW en 2018 con una capacidad instalada acumulada de 500 GW [1], pero para el 2023 el mercado anual fue superior a los 200 GW, con una capacidad instalada acumulada de 1,300 GW.

Para 2050, se espera las energías renovables sean un factor clave de electrificación con una capacidad instalada global del 20 TW, donde se prevé que la energía solar y eólica generen 8.5 y 6 TW acumulativos, respectivamente. La capacidad de energía renovable sería responsable de alrededor del 86% de la demanda eléctrica, con un 60% cubierto por energía solar y eólica [2].

Se dará a conocer breve esquema energético de México, el potencial de la irradiación solar, la tecnología de celdas solares y finalmente visualizar las aplicaciones en el mundo actual.

References:

[1] PV activities in Japan, and global PV highlights, January 2019, RTS Japan.

[2] Global solar may reach 8,500 GW by 2050 – IRENA

<https://www.pv-magazine.com/2019/04/09/global-solar-may-reach-8500-gw-by-2050-irena/>

MARTES 02. 10:00-10:20.

Estudio de uniones tunel de arreglos MxN de Hilos Cuánticos para aplicaciones fotovoltaicas: Control de Dopantes y Perspectivas sobre Cristales de Wigner.

Reyna Méndez-Camacho,^{1*} Máximo López-López,¹ and Esteban Cruz-Hernández²

¹Departamento de Física, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados CINVESTAV-IPN, D. F, México.

²Coordinación para la innovación de la Aplicación de la Ciencia y la Tecnología, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, S. L. P. México

*reyna.mendez@cinvestav.mx

Las celdas solares multi-unión consisten en múltiples capas de materiales semiconductores, cada una diseñada para absorber y convertir una porción diferente del espectro solar en electricidad, en este tipo de dispositivos las uniones túnel desempeñan un papel crucial como contactos de alto rendimiento, proporcionando alta corriente pico, mínima pérdida resistiva y baja pérdida óptica, todo ello influenciado por la banda prohibida en la región de la unión [1]. Para mejorar la eficiencia de la unión túnel, se pueden crear niveles de energía diseñados, siendo una de las metodologías la implementación de nanoestructuras tales como hilos cuánticos (QWr) insertados entre capas altamente dopadas de tipo p y n de uniones túnel convencionales, generando regiones interbanda [1,2]. Estas sub-bandas internas aumentan significativamente la probabilidad de tunelamiento de portadores [1]. Predicciones teóricas y logros experimentales destacan la necesidad de uniones túnel mejoradas para las nuevas celdas solares de multi-unión [3].

En este estudio teórico y experimental, se sugiere una estructura de unión túnel basada en QWr para aumentar notablemente la probabilidad de tunelamiento. La parte experimental, actualmente en proceso y que se detalla en la Fig. 1, se está realizando mediante epitaxia de haces moleculares (MBE). La capa absorbente comprende cinco capas de QWrs intrínsecos de GaAs embebidos en una matriz de $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$, fabricados a través de autoensamblaje en un sustrato de GaAs de alto índice bajo condiciones reportadas en Ref. [4]. En el estudio teórico, presentamos un modelo tridimensional que incorpora un arreglo 2D de MxN QWrs acoplados por efecto túnel y un potencial externo, junto con la interacción e-e en 1D dada por un potencial tipo Yukawa que considera el efecto de muchos portadores a lo largo de los QWr. Nuestro análisis examina el acoplamiento entre QWr adyacentes en términos del coeficiente de transmisión, energías resonantes, densidad de probabilidad y potencial externo (Fig. 2). Este enfoque ofrece un medio valioso para visualizar la coherencia dentro del arreglo MxN-2D, elucidando la dinámica de formación de minibandas, explorando modificaciones inducidas por el potencial externo y evaluando la formación y coherencia de moléculas de Wigner en relación con la geometría y dopaje (Fig. 3).

AGRADECIMIENTOS: Consejo Nacional de Humanidades, Ciencia y Tecnología (CONAHCyT, México) programa Estancias Posdoctorales por México 2022(1) [R. M-C].

[1] K. Barnham y D. Vedenky, Low-Dimensional Semiconductor Structures: Fundamentals and Device Applications (Cambridge University Press 2001).

[2] M. P. Lumb, M. K. Yakes, M. Gonzalez, I. Vurgaftman, C. G. Bailey, R. Hoheisel y R. J. Walters, Appl. Phys. Lett. 100 213907 (2012).

[3] S. Mohammadnejad, N. J. Abkenar y A. Bahrami, Indian J. Phys. 87 971 (2013).

[4] E. Cruz-Hernández, S. Shimomura y V. H. Méndez-García, Appl. Phys. Lett., 2012, 101, 073112.

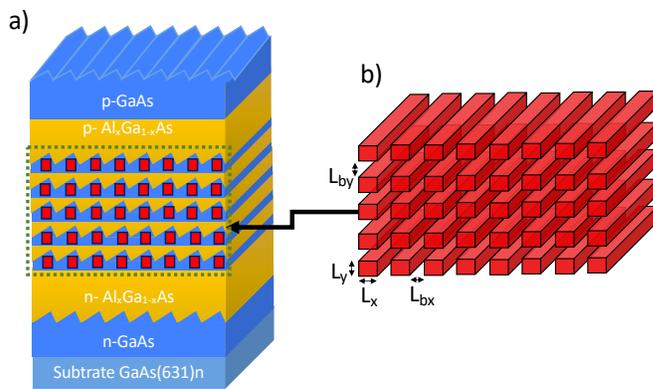


Fig. 1. a) Ilustración del arreglo de QWr considerado para la capa absorbente, que puede crecer mediante MBE y procesos de autoensamblaje, b) Diagrama esquemático de la matriz de QWr rectangular de 8x4 GaAs/AlGaAs.

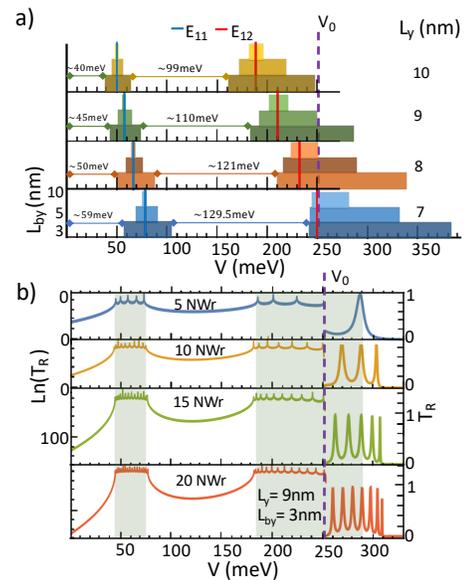


Fig. 2. a) Formación de minibandas 1D en función de la longitud de la L_y y la separación entre QWrs, L_b , b) Coeficiente de transmisión calculado para $L_y=9\text{nm}$ y $L_b=3\text{nm}$, en función del número de capas de QWrs en la región absorbente.

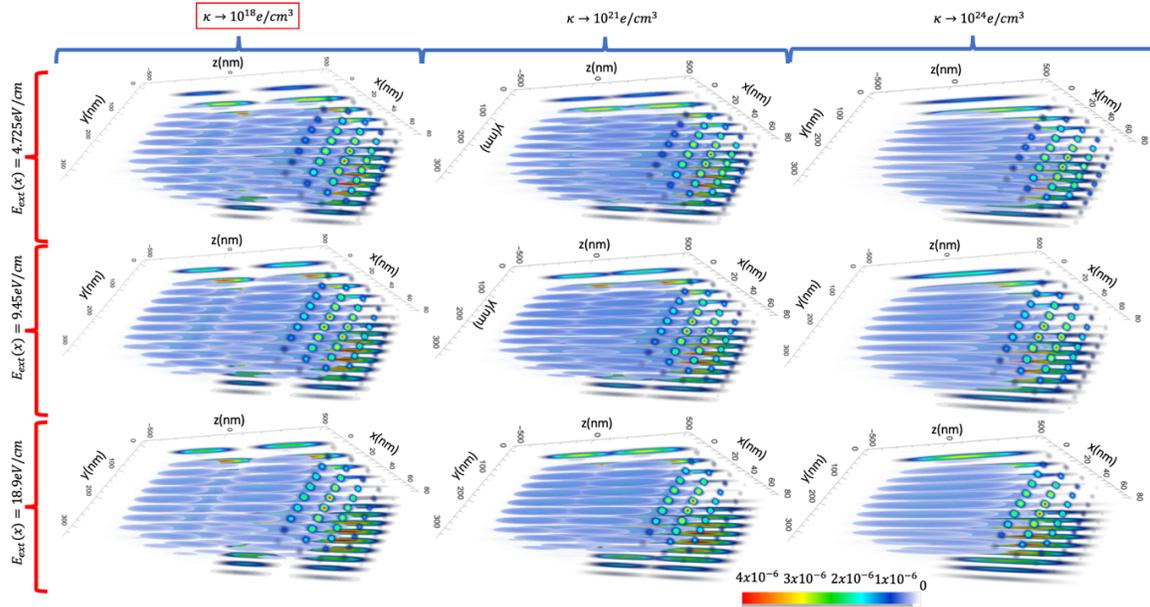


Fig. 2.- Densidad de probabilidad 3D para un arreglo 2D-QWrs de 5x8 de $L_x=9\text{nm}$, $L_{by}=10\text{nm}$, $L_z=1\mu\text{m}$ and $L_{bx}=5\text{nm}$, en función de un campo eléctrico externo. Se usaron 3 diferentes parámetros de apantallamiento en el rango de 10^{18} to $10^{24}e/cm^3$. Se puede observar la distribución doble para la densidad electrónica más baja, señal de la formación de la molécula de Wigner. Para concentraciones altas, el apantallamiento de carga eléctrica permite que los electrones se unan en el centro de los QWrs.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

MARTES 03. 10:20-10:40.

**El nanocarbono dentro del mundo inorgánico de las celdas solares de
 Sb_2S_3**

Oscar Andrés Jaramillo-Quintero

Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco,
Morelos, México

En las últimas décadas, los calcogenuros basados en antimonio, como el sulfuro de antimonio (Sb_2S_3), han llamado la atención de investigadores y científicos para aplicaciones diversas, dado que es un material que presenta propiedades físicas y químicas ajustables, estabilidad química buena, toxicidad baja y abundante a nivel mundial. Sin embargo, para aplicaciones fotovoltaicas, es necesario reducir las trampas del bulto y superficie de las películas de Sb_2S_3 , debido a que son consideradas como uno de los mayores mecanismos de pérdida de energía dentro de las celdas solares de Sb_2S_3 . Por otro lado, los nanomateriales de carbono, los cuales reúnen una gran variedad de nanoestructuras como nanotubos de carbono, grafeno y negros de carbono, han demostrado tener propiedades únicas para aplicaciones en conversión de energía que les permitirá aportar lo mejor del mundo orgánico a las celdas solares inorgánicas. Por estas razones, a lo largo de esta presente charla se abordará la influencia del uso de nanocarbono en celdas solares de Sb_2S_3 , revelando los resultados de investigaciones sobre el empleo de nanocintas de óxido de grafeno reducido como capa interfacial y la incorporación de negro de carbono a la capa de buffer de sulfuro de cadmio para la fabricación de dispositivos híbridos de nueva generación.

Palabras claves: nanocarbono, celdas solares, materiales híbridos, Sb_2S_3 .

Agradecimientos: Al estudiante de doctorado Ronal Edgardo Castellanos Pineda y a los técnicos de IER-UNAM: Enue Barrios-Salgado, Gildardo Casarrubias Segura, Maria Luisa Ramón y Rogelio Morán

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

MARTES 04. 10:40-11:00.

Elaboración de nanopartículas de AgSbS₂ para su desarrollo como capa absorbente en dispositivos fotovoltaicos.

M.V. Morales Gallardo, R.G Sotelo Marquina, N. R. Mathews, X. Mathew
Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México

El AgSbS₂ es un material ternario de la familia de los calcogenuros, ha demostrado ser un semiconductor eficaz en la recolección de luz y con un alto potencial para su aplicación en la energía solar fotovoltaica. En este trabajo, se presenta la síntesis de nanopartículas de AgSbS₂ mediante el método solvotermal, química sencilla y de bajo costo. Las nanopartículas obtenidas exhiben una cristalinidad adecuada y una estequiometría apropiada para su aplicación como capa absorbente en dispositivos fotovoltaicos. Los análisis estructurales revelaron una estructura cúbica centrada en las caras, con un tamaño de cristal de 22 nm y un strain de 3.7×10^{-3} . El patrón de difracción de rayos X (XRD) mostró picos intensos en (2 0 0), (1 1 1) y (2 2 0), coincidiendo con los reportados en la literatura. La espectroscopia Raman confirmó la pureza de la fase del material, con picos característicos en 188 cm⁻¹, 250 cm⁻¹ y 447 cm⁻¹, atribuidos a modos vibracionales del Sb-S y S-Sb-S. Los análisis ópticos revelaron un gap de energía de 1.54 eV, mientras que la fotoconductividad del material se estimó en aproximadamente $2.64 \times 10^{-7} (\Omega \text{ cm})^{-1}$.

Palabras clave: nanopartículas, AgSbS₂, capa absorbente.

Agradecimientos: Los autores expresan su gratitud a la Dra. Enue Barrios por su asistencia en las mediciones del gap de energía, al Dr. José Campos por su asistencia con los equipos de medición, y a la Mtra. María Luisa Ramón García por los análisis de XRD. Además, agradecen al Conacyt por el apoyo brindado a través de una beca posdoctoral para la autora principal 706239, y al soporte financiero de los proyectos PAPIIT IN111824, y IN109324.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

MARTES 05. 11:00-11:20.

El camino para superar los bajos valores de eficiencia en las celdas solares basadas en SnS: un estudio de los diferentes mecanismos de recombinación usando scaps 1-d

F.J. Sánchez Rodríguez^a, I. Montoya de los Santos^b, Maykel Courel^c.

^a*Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Autónoma de Sinaloa, Culiacán, Sinaloa, 80010, México*

^b*Instituto de estudios de la energía, Universidad del Istmo, C.P. 70760 santo domingo Tehuantepec, Oaxaca, México*

^c*Centro Universitario de los Valles (CUValles), Universidad de Guadalajara, Carretera Guadalajara-Ameca Km. 45.5, C.P. 46600, Ameca, Jalisco, México*

El material semiconductor sulfuro de estaño (SnS) tiene un potencial para aplicaciones de celdas solares. Sin embargo la tecnología basada en SnS no ha podido superar la barrera de eficiencia del 5%, por esta razón es necesario estudiar los factores limitantes. En este trabajo se discute en detalle el análisis del impacto de los mecanismos de recombinación es decir, radiativos y no radiativos, debido a defectos en el bulto y en la intercara SnS/CdS en el J-V característico de la celda solar SnS/CdS, este estudio se realiza por primera vez usando el software SCAPS. Además se estudió el impacto del grosor de las capas SnS y CdS, las resistencias en serie y en paralelo, la densidad de defectos en el bulto del SnS, la densidad de defectos en la intercara y la concentración de aceptores. En este estudio de demuestra que el dispositivo puede tener un aumento de eficiencia del 2.03 % al 14.7%.

MARTES 06. 11:20-11:40.

Study on the thermoelectric properties of $(\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x})_2\text{Se}_3$ thin films

Itzayana Segundo Suarez, R.G. Sotelo Marquina, X. Mathew, N.R Mathews*

*Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México; Temixco,
Morelos, 62580, México.*

* *nrm@ier.unam.mx*

Thermoelectric materials are used to generate electricity from heat, these materials can use any thermal source including solar energy and waste heat, therefore, thermoelectric materials play a main role in the development of energy-sustainable and alternative technologies. In this work we report the synthesis and characterization of ternary of $(\text{Bi}_x\text{Sb}_{1-x})_2\text{Se}_3$ thin films by varying the molar concentration of Bi and Sb in precursor solution. The XRD results of Bi_2Se_3 showed the parajuanite phase, according to PDF# 360214, with rhombohedral crystal structure. The estimated crystalline size was about 18 nm and lattice parameters $a= 4.2 \text{ \AA}$ and $c= 28.64 \text{ \AA}$. Bi_2Se_3 thin films showed a Seebeck coefficient of -151 mV/K , while the addition of Sb led to a decrease in the Seebeck coefficient. When the $\text{Bi}/(\text{Bi}+\text{Sb})$ molar precursor was 0.25, the Seebeck coefficient changed to positive, indicating a change in conductivity of the films. Pure Sb_2Se_3 showed a positive zeebeck coefficient of $+211 \text{ mV/K}$.

Keywords: Bi_2Se_3 , $(\text{Bi}_x\text{Sb}_x)_2\text{Se}_3$, Seebeck.

Acknowledgment: This work was realized in IER-UNAM facilities, with financial support of PAPIIT IN111824, and IN109324. The authors thank María Luisa Ramon García by the XRD, Jose Campos Seebeck coefficient measurements, Gildardo Casarrubias Segura for technical assistance.

**DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES**

MARTES 07. 11:40-12:00.

Celdas basadas en SnS, desafíos para mejorar la eficiencia.

Fernando Ayala Mató

Investigador Posdoctoral en el IER-UNAM y profesor en la Universidad Politécnica del
Estado de Morelos

El SnS es un material semiconductor que ha ido ganando interés dentro de la comunidad científica como absorbedor en celdas solares. En esta ponencia se presentarán las características del material que lo hacen un buen candidato como absorbedor, las diferentes técnicas de depósito y se discuten las principales causas de las bajas eficiencias en estas celdas. Se presentan resultados obtenidos dentro del grupo de trabajo del IER – UNAM mediante la técnica de depósito por baño químico y se discuten posibles estrategias que podrían mejorar la eficiencia con el empleo de esta técnica.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

MARTES 08. 13:00-13:20.

**Metodología-Verde para el depósito de películas delgadas por la
técnica de Depósito por Baño Químico**

María de Lourdes Albor Aguilera

Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro
Zacatenco, CDMX, 07738, México.

El semiconductor sulfuro de cadmio (CdS) es uno de los más utilizados como material ventana en el desarrollo de solares del tipo CdTe, CIS, CIGS y CZTS. La técnica de depósito por baño químico (DBQ) ha sido utilizada por muchos investigadores para el depósito de películas delgadas. Los residuos químicos derivados del proceso de DBQ son un problema, debido a la alta cantidad de soluciones precursoras utilizadas. El objetivo de este trabajo es analizar cómo se podría reducir la cantidad de soluciones precursoras utilizadas para el crecimiento de CdS y al mismo tiempo poder tener películas con propiedades físicas adecuadas para ser utilizadas en dispositivos fotovoltaicos. Las películas delgadas de CdS se depositaron sobre sustratos de soda lima/SnO₂:F (FTO) en áreas de 4 cm² y 100 cm², los espesores variaron de 30 nm a 120 nm. La caracterización morfológica revela diferentes formaciones superficiales en función de la cantidad de solución utilizada, se obtuvieron valores de resistividad del orden de 10⁵ Ω*cm, valores de transmitancia del 45% al 94% en la región visible y valores de energía de banda prohibida de alrededor de 2.1 eV- 2.4 eV. Como resultado de este estudio, es posible reducir los desechos tóxicos generados durante el proceso de depósito con tan solo manipular la posición del sustrato dentro del vaso reactor, lo cual nos permite disminuir el impacto ambiental al utilizar este tipo de técnica química para el depósito de películas delgadas.

Palabras clave: CdS, CBD, residuos tóxicos, proceso eficiente.

Agradecimientos: IPN Proyectos: SIP20240539.



Figura 1. (a) Vaso reactor con 3 lts de solución para depositar un área de 100 cm^2 , impacto ambiental negativo, (b) Manipulación de la posición de los sustratos dentro del vaso reactor para disminuir la cantidad de solución para el depósito de películas delgadas de CdS.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

MARTES 09. 13:20-13:40.

Influencia de la variación de temperatura en el depósito de películas delgadas de CdS por DBQ

JM Flores-Marquez^{1*}, C Hernandez-Vasquez², MA González-Trujillo², Y Matsumoto-Kuwabara³, ML Albor-Aguilera⁴

¹Instituto Politécnico Nacional-ESIQIE, Depto. de Ingeniería en Metalurgia y Materiales, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México.

²Instituto Politécnico Nacional-ESCOM, Formación Básica, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México.

³Instituto Politécnico Nacional-CINVESTAV, Sección de Electrónica del Estado Sólido, Av. IPN 2508, San Pedro Zacatenco, CDMX, 07360, México.

⁴Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México.
jfloresm@ipn.mx (JM Flores-Marquez).

El CdS es un tipo de semiconductor típicamente utilizado en celdas solares del tipo CdS/CdTe como material ventana debido a su alta transmitancia óptica y su amplia brecha de energía prohibida (2.20-2.50 eV). Usualmente el CdS es depositado por la técnica de Depósito por Baño Químico (DBQ), que es una técnica de bajo costo basada en soluciones y reacciones químicas, que permite manipular el espesor de las películas, incluso menores a 100 nm, se lleva a cabo a bajas temperaturas de depósito ($< 75\text{ }^{\circ}\text{C}$) y es compatible con diferentes tipos de sustratos. Las reacciones químicas son influenciadas por la transferencia de calor, en consecuencia, los parámetros tales como el tiempo de depósito y las rampas de temperatura, así como las propiedades físicas de las películas ultra-delgadas de CdS se ven modificadas en dependencia del tipo de indicador de temperatura. Un sistema de encendido-apagado tiene un rango de $\pm 2^{\circ}\text{C}$ de variación de la temperatura, utilizando un contenedor de vidrio de bajo volumen de agua, mientras que un indicador controlador termostático provee un rango de $\pm 0.1^{\circ}\text{C}$ de variación de la temperatura utilizando un contenedor polimérico de mayor volumen de agua. Los parámetros óptimos de crecimiento fueron obtenidos para controlar en valor del espesor en un rango de 30 a 120 nm en dependencia de la aplicación, incluyendo el depósito de películas ultra-delgadas de CdS aplicadas como material ventana en celdas solares de CdTe. Además, la facilidad de dopar al CdS mientras se lleva a cabo la reacción principal puede conducir al mejoramiento del desempeño de los dispositivos fotovoltaicos permitiendo el desarrollo de novedosas estructuras, incluyendo algunos compuestos ternarios. Películas delgadas de CdS fueron depositadas utilizando un DBQ de encendido-apagado y termostático sobre sustratos FTO ($\text{SnO}_2:\text{F}$) a 75°C a diferentes tiempos de depósito utilizando CdCl_2 (0.1 M), $\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ (0.3 M) como soluciones precursoras, y NH_4Cl (0.2 M), NH_4OH (2 M) como promotores de formación de compuestos complejos. La

comparativa de algunas propiedades físicas fueron estudiadas, incluyendo propiedades ópticas, morfológicas y estructurales.

Palabras clave: CdS, DBQ termostático, celdas solares de CdTe.

Agradecimientos: JMFM agradece a los proyectos SIP 20240539, 20240550, 20240551 y 20240552 del IPN, JMFM y CHV agradecen al CONAHCYT-México, JMFM agradece a AR Andrade-Plata, A Cruz-Francisco and DD Martínez-Vergara por sus contribuciones en este trabajo.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

MARTES 10. 13:40-14:00.

**Desempeño de contactos metálicos en el desarrollo de Celdas solares del
Tipo CdS/CdTe**

C. Hernandez Vasquez¹, J.M. Flores Marquez², M.A. González Trujillo¹, M.L. Albor
Aguilera³

¹Departamento de Formación Básica, ESCOM- Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de
México, México

²Departamento de Metalurgia y Materiales, ESQIE- Instituto Politécnico Nacional, Ciudad
de México, México

³Departamento de Física, ESFM-Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de México, México
chernandezva@ipn.mx

A lo largo de los años se han desarrollado celdas solares con diferentes configuraciones en las cuales se han empleado contactos metálicos diversos que permiten extraer de manera eficiente a los portadores de carga fotogenerados. En la tecnología de CdTe se utilizan contactos de Cu/Au como contactos estables para dichos dispositivos. En este trabajo se muestran comparativas con diferentes contactos metálicos propuestos en el desarrollo de celdas solares Mo/Cu, MoO₂/Ni, MoO₃/Ni, TeO₂/Cu/Au, y ZnTe/Au/Cu. Donde se estudia la respuesta eléctrica (eficiencia, factor de forma, densidad de corriente y voltaje) de cada contacto metálico en los dispositivos fotovoltaicos, así como las resistencias asociadas.

Keywords: CdTe, Celdas Solares, Contactos Metálico

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

MARTES 11. 14:00-14:20.

Celda solar con absorbedor $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4/\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{SSe})_4$ incorporando pozos cuánticos: resultados de simulación bajo condiciones reales.

Karina G. Rodríguez Osorio, Maykel Courel

Centro Universitario de los Valles (CUValles), Universidad de Guadalajara, Carretera Guadalajara-Ameca Km. 45.5, C.P. 46600, Ameca, Jalisco, México

El uso de nanoestructuras como pozos cuánticos permite aprovechar el potencial que en la actualidad prevalece en el material Kesterita como absorbedor en celdas solares, por la presencia y baja toxicidad de sus elementos en la Tierra, por su transición de tipo directa y por su límite teórico de eficiencia aún no alcanzado en los últimos reportes de la literatura entre otras cualidades. Habiendo hecho un estudio previo de simulación para la celda solar $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4/\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{SSe})_4$ con pozos cuánticos en circunstancias ideales, en el presente trabajo se da a conocer los avances del análisis de la celda ahora bajo el límite no radiativo, considerando parámetros que representan una celda real. Algunos de éstos son composición, ancho y número de pozos, número de aceptores y de donores, velocidad de recombinación, tiempo de vida de los portadores minoritarios, resistencias en serie y en paralelo, entre otros. Los resultados muestran que la celda solar bajo condiciones reales es capaz de alcanzar una eficiencia máxima de casi el 27%.

MARTES 12. 14:20-14:40.

Study of the postdeposition thermal treatment of Sb₂S₃ thin films deposited by hydrothermal method

R.G. Sotelo Marquina, N.R Mathews, X. Mathew*

Instituto de Energía Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos, 62580, México

In this work, we present the development of Sb₂S₃ thin films by hydrothermal method. As deposited films were amorphous and was crystallized to stibnite (Sb₂S₃) phase after thermal treatment in the temperature range 275 to 350 °C. The films with higher photosensitivity were obtained at an annealing temperature of 300 °C under N₂ atmosphere. From the XRD data the crystal size and lattice parameters were estimated as 24 nm, and a=11.20, b=11.28 and c=3.8 Å, respectively. The Raman spectrum confirmed the presence of pure stibnite phase with the vibrational modes at 190 (Ag), 237 (Bg), 282 (Ag) and 312 (Bg) cm⁻¹ corresponding to the Sb₂S₃. The band gap of the film was 1.7 eV close to the reported value. The photosensitivity of the films improved from 1.79x10⁻⁴ to 5.29 x10⁻⁴ after annealing in presence of Sulfur. The atomic composition of these films was nearly stoichiometric: Sb= 41.7 % and S=58.03 %. The application of this material as photocathode for photoelectrochemical hydrogen production will be discussed.

Acknowledgment: This work was realized in IER-UNAM facilities, with financial support of the projects PAPIIT IN111824, and IN109324. The authors acknowledge María Luisa Ramon García for XRD, Jose Campos Seebeck coefficient measurements, Gildardo Casarrubias Segura for technical assistance.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

MARTES 13. 14:40-15:00.

Estudio de la reducción del Mn^{4+} a Mn^{2+} en el $PbTiO_3$ a través de EPR

Daniel Ramírez Rosales
ESFM-IPN

En este trabajo se hicieron estudios de Resonancia Paramagnética Electrónica (EPR) en las cerámicas ferroeléctricas $PbTiO_3$, $PbTi_{0.98}Mn_{0.02}O_3$ y $Pb_{0.88}Ti_{1-y}Mn_yO_3$ ($y= 0.0, 0.1, 0.2, 0.3$). La reducción de Mn^{4+} a Mn^{2+} en las cerámicas $PbTi_{0.98}Mn_{0.02}O_3$ y $Pb_{0.88}Ti_{1-y}Mn_yO_3$, es demostrada. La presencia del catión Eu es necesaria para que dicha reducción tome lugar, mientras que en la cerámica que no tiene Eu ($PbTi_{0.98}Mn_{0.02}O_3$) la reducción no se efectúa. Los análisis de los espectros EPR indican que la sustitución de Mn^{4+} ocurre en el sitio del Ti^{4+} en dos posiciones diferentes y solo distinguibles por EPR. Ambos factores, esto es, la reducción $Mn^{4+} \rightarrow Mn^{2+}$ y la presencia del Eu^{3+} , son los responsables de las microtensiones y del detrimento de la cristalinidad que ha sido observada en las cerámicas. Estos últimos factores parecen desempeñar un papel crucial para conseguir la anisotropía piezoeléctrica en el sistema.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

MARTES 14. 15:00-15:20.

**Estudio DFT de la densidad de estados electrónicos de las aleaciones
CdTe, GaAs y CdS.**

G. Ramírez-Dámaso^{1, *}, J. E. White-Narváez² y F. L. Castillo-Alvarado^{2, **}

¹ Departamento de Física, Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional, Unidad Profesional Adolfo López Mateos, Ed. 9 C.P. 07738, Alcaldía GAM, Ciudad de México, México.

² Sección de Estudios de Posgrado e Investigación, ESIA U. Ticomán, Instituto Politécnico Nacional, Av. Ticomán No. 600, Col San José Ticomán, CP 07340, Alcaldía GAM, Ciudad de México, México.

* Becario EDI-Instituto Politécnico Nacional.

** Becario COFAA-Instituto Politécnico Nacional.

gramirezd@ipn.mx.

A pesar de haber sido descubierto a principios del siglo XX, el efecto fotoeléctrico encontró una de sus aplicaciones en las celdas solares hasta finales del mismo siglo, teniendo al silicio como uno de los elementos semiconductores principales. La eficiencia de las celdas solares de silicio es de cerca del 27 % en la conversión de la energía solar a eléctrica, lo que no las hace tan atractivas, motivo por el cual se han buscado otros materiales que tengan mayor eficiencia, a partir de su ancho de banda prohibida. Para mejorar la eficiencia de las celdas solares se han propuesto otros materiales como el germanio (Ge), el arsénico (As) o el galio (Ga), entre otros, además de sus aleaciones (CdTe, GaAs, CdS) cuyas eficiencias de conversión de la energía solar a energía eléctrica es del orden de 34 %. En este trabajo usamos la teoría DFT, empleando el programa de simulación molecular Materials Studio, en particular los módulos CASTEP y DMol3 para determinar su densidad de estados electrónicos y su ancho de banda prohibido. También se presentan los resultados de la estructura geométrica de cada aleación, verificándose su aproximación con los datos experimentales reportados en la literatura.

Palabras clave: teoría DFT, densidad electrónica de estados, ancho de banda prohibido.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS

MARTES 01. 10h00–10h30. Estudio de la adsorción de átomos de litio en una nanoestructura de carbono formada por un semifullereno (C30) y una capa de grafeno.

Mónica Araceli Canales Lizaola¹, Juan Manuel Ramírez de Arellano¹, Luis Fernando Magaña Solís², Juan Salvador Arellano Peraza³

¹ Tecnológico de Monterrey; ² Instituto de Física–UNAM; ³ UAM Azcapotzalco.

Por medio de la teoría de la funcional de densidad (DFT) realizamos simulaciones numéricas, utilizando métodos computacionales de primeros principios, para estudiar la adsorción de átomos de litio en un sistema mixto formado por un semifullereno (C30) absorbido en una capa de grafeno (5, 5). Este sistema está formado por 74 átomos de carbono. Se estudiaron dos configuraciones distintas del sistema, a saber: cuando el semifullereno se adsorbe al grafeno considerando la base una cara pentagonal y cuando se adsorbe al grafeno tomando como base una cara hexagonal. En las dos configuraciones encontramos que el sistema puede adsorber una proporción mayor de átomos de litio que la que se espera regularmente para los sistemas formados por grafeno, donde se adsorbe un átomo por cada seis átomos de carbono, hasta antes de que estos formen cúmulos o *clusters*. Tenemos que en la base pentagonal hay 23 átomos de litio en el sistema pentagonal y hasta 22 átomos de litio en el sistema hexagonal. La energía de adsorción por átomo de litio en el sistema es de -0.23 eV considerando la base pentagonal y de -0.47 eV considerando la base hexagonal.

Además, calculamos una DM a 300K de las dos configuraciones finales del sistema, es decir, una vez que ya se obtuvo la capacidad máxima de adsorción de litios para cada uno de los sistemas se observa que no hay desorción de los átomos de litio.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS

MARTES 02. 10h30–11h00. Cálculo de primeros principios en carburos monocapa MXenos.

Nadxieli Delgado Jiménez¹

¹ Instituto de Física–UNAM

Mediante el uso de DFT y cálculos *ab initio* o de primeros principios, y utilizando el software computacional Quantum ESPRESSO, se calcularon las bandas de energía y las propiedades ópticas del carburo de niobio y el carburo de estaño monocapa para determinar si se trata de materiales conductores o semiconductores. Estos carburos forman parte de los conocidos MXenos, que han despertado el interés de la comunidad de científicos de materiales desde que se encontraron algunas similitudes con el grafeno. Pero teniendo una banda prohibida, facilita su aplicación como sensores.

El estudio de ambos carburos se realizó también con la corrección de acoplamiento espín–órbita. Ambos materiales mostraron propiedades ópticas ideales para su aplicación en la optoelectrónica, ya que consisten en materiales semiconductores.

**MARTES 03. 11h00–11h30. Átomo de hidrógeno confinado en presencia
de un campo magnético: entropía de Shannon**

Marisol R. Arcos¹, Adrián M. Escobar²

¹ Tecnológico de Monterrey; ² UAM Iztapalapa.

En el presente estudio se considera un átomo de hidrogeno, en presencia de un campo magnético constante $\mathbf{B} = B \hat{z}$, confinado en una cavidad esférica impenetrable de radio r_0 .

Se utiliza la aproximación de Born–Oppenheimer con el protón en el centro de la cavidad esférica. En este caso, en el problema de eigenvalores es posible separar completamente uno de los tres grados de libertad.

Para los estados de menor energía con números cuánticos $m = 0, \pm 1, \pm 2$ y $p = 0, 1$, asociados a los operadores de momento angular \hat{L}_z y de paridad $\hat{\Pi}$ ($z \rightarrow -z$), respectivamente, se calculan de forma variacional las soluciones aproximadas de la ecuación de Schrödinger como función del campo magnético B y del radio de confinamiento r_0 . La función de prueba depende de tres parámetros variacionales -físicamente relevantes- que incluyen el producto entre un orbital de Coulomb y un orbital de Landau basal. Finalmente, con estas soluciones aproximadas se lleva a cabo un análisis sobre las medidas de localización electrónica mediante el cómputo de la entropía de Shannon y de la información de Fisher ambas en la representación de posición.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS

**MARTES 04. 11h30–12h00. Sensores de gas y diseño de materiales
«halfmetall» utilizando metales sustitucionales en vacancias de azufre de
monocapas de disulfuro de Tungsteno: adsorción de moléculas de NO, CO
y O₂**

Eduardo Rangel Cortés¹, Alan Joel Miralrio Pineda¹

¹ Tecnológico de Monterrey

El estudio de la adsorción de algunas moléculas diatómicas (O₂, CO y NO) sobre monocapas de disulfuro de tungsteno (WS₂), contaminadas con átomos sustitucionales de cobre (Cu), oro (Au) y plata (Ag), fue realizado mediante teoría funcional de la densidad (DFT), con una corrección de dispersión (D3). Las energías de adsorción de los metales sustitucionales en las vacancias (simples y dobles) de átomos de azufre y las barreras de energía de difusión (Cu, Ag y Au), muestran la estabilidad de los átomos metálicos en los defectos a temperaturas superiores de 700 K.

Además, los átomos sustitucionales introducen estados impuros en la región prohibida, entre las bandas de conducción y valencia de la monocapa. Como resultado de la activación de la monocapa de WS₂, por la introducción de átomos metálicos sustitucionales, las moléculas de NO, CO y O₂ son adsorbidas químicamente. De modo que un análisis en la densidad de estados totales y parciales, demuestran que las monocapas contaminadas con átomos sustitucionales, podrían utilizarse para el diseño de dispositivos (magnéticos y electrónicos) de detección de moléculas de NO y CO. Si las monocapas se exponen al aire, las moléculas O₂ oxidan a los átomos metálicos, induciendo un comportamiento «halfmetall» en algunos de los sistemas. Estas superficies podrían utilizarse para el diseño de dispositivos en aplicaciones de espintrónica.

DÉCIMO OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
JUNIO 24-26, 2024
MARTES 25. SESIÓN DE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS

MARTES 05. 12h00–12h30. Estructura electrónica de Siliceno y Siliceno dopado y sus aplicaciones en transistores de efecto de campo

Sebastián Pérez Patricio¹, Emiliano Montaña G¹, **Roxana M. del Castillo**¹

¹ Facultad de Ciencias–UNAM.

Investigamos las propiedades electrónicas del siliceno prístino y del siliceno dopado en su configuración de bajo pandeo, que presenta propiedades electrónicas similares a las del grafeno. Se consideraron tres celdas unitarias de siliceno: configuraciones planar (PL), de bajo pandeo (LB) y de alto pandeo (HB). Se realizaron cálculos de optimización geométrica, análisis de bandas de energía y cálculos de densidad de estados. La configuración LB resultó ser la más estable y se utilizó para diseñar superceldas de 4×4 . Las superceldas de 4×4 se doparon con diversas configuraciones (vacantes, O y OH) para evaluar su comportamiento conductor. El dopaje con O dio lugar a un comportamiento conductor, mientras que las vacantes y el dopaje con OH produjeron semiconductores de tipo p, lo que indica que la superficie de siliceno transfirió carga a los dopantes. Además, las películas dopadas con O y OH presentaban el mayor número de átomos enlazados, como demuestran sus bajos valores de energía de enlace. Se observaron las curvas voltaje-corriente (IV), que revelaron la ausencia de rectificación en las capas conductoras (O) y la rectificación en las capas semiconductoras (vacantes y OH). Mientras que las vacantes sí mostraban rectificación, los voltajes más altos entre los electrodos conducían a una conductancia más baja. El caso del OH no sólo rectificó, sino que mantenía una conductancia constante bajo variaciones de voltaje. Estos resultados sugieren la viabilidad de proponer un FET con un canal basado en silicio dopado con OH.

Compuestos multi-laminados elásticos micropolares. Propuesta para una posible reparación de fractura ósea

R. Rodríguez-Ramos^{1,2}, Y. Espinosa-Almeyda³, J. A. Otero⁴, H. Camacho-Montes³, P. Rodríguez-Bermúdez⁵, F. J. Sabina⁶

¹Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, Vedado, La Habana, CP 10400, Cuba.

²PPG-MCCT, Universidade Federal Fluminense, Av. dos Trabalhadores 420, Vila Sta. Cecília, CP 27255-125 Volta Redonda, RJ, Brazil.

³Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Av. Del Charro 450 Norte Cd. Juárez, Chihuahua, CP 32310, México.

⁴Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. al Lago de Guadalupe Km. 3.5, CP 52926, Edo. de México, México.

⁵Departamento de Ciencias Exactas, Universidade Federal Fluminense, Av. dos Trabalhadores 420, Vila Sta. Cecília, CP 27255-125 Volta Redonda, RJ, Brazil.

⁶Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas, Universidad Nacional Autónoma de México, Alcaldía Alvaro Obregón, Apartado Postal 20-126 01000, CDMX, México.

Resumen

El método de homogeneización asintótica de dos escalas se aplica para encontrar las propiedades efectivas de los medios laminados periódicos Cosserat con constituyentes centro simétricos y condiciones de contacto de interfaz perfectas/imperfectas. La interfaz imperfecta significa que las tracciones y las tensiones acopladas son continuas pero los desplazamientos y las microrotaciones son discontinuos a lo largo de la interfaz imperfecta. Los saltos en los componentes desplazamiento y microrotación son proporcionales a sus respectivos componentes de tracción y tensión acoplada en términos de un tipo factor de resorte. Se proponen expansiones en serie en función de estructuras en las escalas macro y micro para los campos de desplazamiento y microrotación. Los problemas locales están resueltos y las propiedades efectivas se dan en función de las propiedades materiales de los constituyentes, los volúmenes de fracciones de las fases y los parámetros de imperfección. Se obtienen y discuten los resultados numéricos para un compuesto Cosserat bi-laminado asumiendo múltiples particiones de imperfección en la interfaz y diferentes rangos para los valores de los parámetros de imperfección. También se analizan las estructuras de Fibonacci bajo perfecta adherencia por contacto. Se ilustran los efectos de las imperfecciones y las rotaciones de las propiedades de los materiales constitutivos de cada capa sobre las propiedades efectivas. Además, considerando la prevalencia de los medios micropolares en sistemas bio-inspirados, se evalúa la aplicabilidad del modelo para la reconstrucción de fracturas óseas utilizando bio-compuestos multi-laminados. Un hallazgo importante en esta simulación bio-inspirada está relacionado con el análisis de un compuesto micropolar bi-laminado periódico cuyos constituyentes isotrópicos son un material bio-cerámico y un hueso compacto. Este material artificial bio-inspirado debe integrarse con el tejido huésped para favorecer el crecimiento celular, ser estable y compatible. Estas características son cruciales en la mejora del hueso fracturado.

Correo electrónico del autor de correspondencia: rerora2006@gmail.com,
reinaldorr@id.uff.br

Propiedades efectivas de compósitos elásticos trifásicos reforzados con fibras unidireccionales diferentes y no concéntricas

Y. Espinosa-Almeyda^{1,*}, R. Rodríguez-Ramos^{2,3}, J. A. Otero⁴, H. Camacho-Montes¹, P. Rodríguez-Bermúdez⁵, F. J. Sabina⁶

¹Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Av. Del Charro 450 Norte Cd. Juárez, Chihuahua, CP 32310, México.

²Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, Vedado, La Habana, CP 10400, Cuba.

³PPG-MCCT, Universidade Federal Fluminense, Av. dos Trabalhadores 420, Vila Sta. Cecília, CP 27255-125 Volta Redonda, RJ, Brazil.

⁴Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. al Lago de Guadalupe Km. 3.5, CP 52926, Edo. de México, México.

⁵Departamento de Ciencias Exactas, Universidade Federal Fluminense, Av. dos Trabalhadores 420, Vila Sta. Cecília, CP 27255-125 Volta Redonda, RJ, Brazil.

⁶Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas, Universidad Nacional Autónoma de México, Alcaldía Alvaro Obregón, Apartado Postal 20-126 01000, CDMX, México.

Resumen:

En la presente contribución, el método de homogeneización asintótica de dos escalas (MHA) es implementado para obtener las propiedades efectivas de materiales compuestos trifásicos elásticos periódicos. La estructura trifásica es definida por una matriz reforzada por dos tipos de fibras cilíndricas unidireccionales. La sección transversal del medio (celda doblemente periódica) es caracterizada por una estructura rectangular que posee dentro dos fibras circulares no concéntricas con propiedades materiales y radios diferentes. En este marco, el problema de elasticidad lineal estático se plantea mediante un sistema de ecuaciones diferenciales parciales sujeto a condiciones uniformes de contorno y condiciones de contacto perfectas en las interfaces. Como consecuencia de la implementación del MHA, se derivan el planteamiento matemático de los problemas locales en la celda periódica, así como la formulación de los coeficientes efectivos. Como caso particular, las propiedades efectivas antiplanas de compuestos elásticos trifásicos fibrosos son calculadas. Para este caso, la formulación correspondiente de los problemas locales y las propiedades efectivas son planteadas. Finalmente, resultados numéricos son presentados y se analiza la precisión de las soluciones a través de comparaciones con el método semi-analítico de los elementos finitos (SAFEM). Las fórmulas y los resultados presentados aquí pueden ser útiles como puntos de referencia para validar los resultados de cálculos experimentales y numéricos.

Correo electrónico del autor de correspondencia: Yoanh Espinosa-Almeyda, yoanhealmeyda1209@gmail.com

Ceramic sintering and properties characterization based on solid mechanics.

H. Camacho Montes, Y. Espinosa Almeyda, J. D. Gamboa Garay, L. E. Barraza de León, A. Vega Siverio, I. M. Espinoza Ochoa, J.O: Herrera Robles, J. A. Otero Hernández, R. Rodríguez Ramos, B. J. Mederos Madrazo, F. J. Sabina, R. K. Bordia.

Resumen:

Ceramic processing can be tedious and time-consuming. Several techniques have been developed to face these complex processing. One of the most popular techniques relies on different approaches for Design of Experiments and/or statistical process control. However, solid mechanics offers considerable potential to describe the polycrystal structure – properties relationship as well as the densification and deformation during sintering. In the present work, the estimation of effective properties for polycrystal is developed based on a homogenization technique applied to a representative volume element (RVE) with the help of Finite Element Method (FEM). Applying this model, the effect of the crystallographic texture on the ceramic properties can be estimated considering the interaction at grain boundaries, which provides a more realistic analysis of the material properties. As an example, it is shown a RVE build from Electro Backscattering Diffraction (EBSD) and the overall properties are connected with pole figure. As a second example, densification and deformation is described during sintering. Constitutive laws for this kind of problem have been a topic that has attracted the researcher attention for decades. These laws include the effect of densification as well as some structural parameters such as grain growth. FEM simulation allows to obtain maps to describe the density, stress, and deformation distribution to have a better characterization of macroscopic deformation during sintering. The viscous parameter that describes sintering can also be obtained from a sinter forging unit and considered for the simulation process. This could be a more direct way to characterize sintering for a constrained system, for example, a bilaminar layer where high stresses can be developed at the interphase. These examples show how helpful can be solid mechanics to characterize ceramics materials.

Método semianalítico de elementos finitos aplicado para el cálculo de propiedades efectivas en compuestos fibrosos micropolares

J. A. Otero^a, Y. Espinosa-Almeyda^b, R. Rodríguez-Ramos^{c,d}

^aEscuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Carr. al Lago de Guadalupe km. 3.5, Estado de México, CP 52926, México

^bInstituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Av. del Charro 450 Norte, Cd. Juárez, Chihuahua, CP 32310, México

^cPPG-MCCT, Universidade Federal Fluminense, Av. dos Trabalhadores 420, Vila Sta. Cecília, Volta Redonda, RJ, CP 27255-125, Brazil.

^dFacultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, Vedado, La Habana, CP 10400, Cuba.

Resumen:

Se implementa un método semianalítico de elementos finitos basado en la combinación del método de homogeneización asintótica a dos escalas (AHM) y el método de elementos finitos (FEM) para obtener las propiedades efectivas de los compuestos Cosserat reforzados con fibras. Las fibras se distribuyen periódicamente en una forma unidireccional y se alinean en una dirección dentro de una matriz. Este marco establece el problema micropolar elástico lineal estático a través de ecuaciones diferenciales parciales sujetas a condiciones de contorno y condiciones de contacto de interfaz perfectas. La formulación matemática de los problemas locales y de los coeficientes efectivos son presentados por AHM. Los problemas locales obtenidos de AHM se resuelven mediante la implementación de FEM a través el método de los residuos pesados y el método de Galerkin. Finalmente, se dan resultados numéricos para los coeficientes efectivos. Las fórmulas y resultados presentados en este trabajo pueden ser útiles para el diseño de materiales compuestos micropolares fibrosos.

Obtención numérica de los modos normales en una placa, a partir de su simetría

F. Ramírez-Ramírez^a, A. Morales^a, L. Gutierrez^a, G. Monsiváis^b y J. A. Otero^c

^aInstituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad 1001, 62210, Cuernavaca, Morelos, Mexico ^bInstituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, P. O. Box 20-364, 01000, Ciudad de México, Mexico

^cEscuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Carr. al Lago de Guadalupe Km. 3.5, Atizapán de Zaragoza, 52926, Estado de México, Mexico

Resumen:

En este trabajo se estudiarán y se obtendrán numéricamente, todos los modos de vibración posible en un sistema elástico bidimensional, lineal e isotrópico; es decir, los modos de oscilaciones flexionales blandos dentro y fuera del plano, torsionales y compresionales. Para esto nos ayudaremos de la simetría de una placa completa y de las condiciones a la frontera de 1/8 de la placa. El método numérico que utilizaremos para tal objetivo es elemento finito, con el cual obtendremos los modos propios de vibración; además utilizaremos las ecuaciones constitutivas de la teoría de la elasticidad para obtener las condiciones a la frontera de los esfuerzos. Los resultados obtenidos son muy prometedores, ya que reproducimos en poco tiempo y de forma separada, todas las eigenfrecuencias de una placa completa, a partir de 1/8 de la placa.

Efecto de la ocurrencia de réplicas sísmicas sobre estructuras de acero de pequeña y mediana altura desplantadas en suelos blandos de la CDMX

Gerardo Díaz Martínez

Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Carr. al Lago de Guadalupe km. 3.5, Estado de México, CP 52926, México

Resumen:

Las estructuras construidas en zonas de alta sismicidad no solo quedan expuestas a los efectos de un evento principal, sino a los de una secuencia que consiste en movimientos precursores, evento principal y réplicas. Bajo ciertas circunstancias, las réplicas pueden incrementar de manera importante las demandas de desplazamiento máximo y residual impuestas por el evento principal al sistema estructural. Como consecuencia, las réplicas tienen el potencial de incrementar el nivel de daño estructural e, incluso, provocar el colapso de una estructura que haya sobrevivido de manera adecuada el evento principal. Ejemplos de lo anterior se observaron en la Ciudad de México durante el sismo de Michoacán del 19 de septiembre de 1985 ($M_w = 8.0$) y su respectiva réplica, ocurrida el 20 de septiembre ($M_w = 7.6$). Varios edificios de mediana altura estructurados con base en marcos rígidos de concreto reforzado y ubicados en la Zona del Lago de la Ciudad de México, incrementaron su nivel de daño e incluso colapsaron durante la réplica que ocurrió al día siguiente de la ocurrencia del evento principal.

La respuesta de edificios sujetos a secuencias sísmicas evento principal-réplica de banda angosta no ha sido suficientemente estudiada. Para ayudar a entender los efectos de las réplicas en sistemas estructurales construidos en suelos muy blandos, se establece la respuesta dinámica y desempeño sísmico de una serie de marcos regulares a través del uso de sistemas equivalentes de un grado de libertad. Se ofrece una discusión en términos de las propiedades estructurales de los marcos, y la intensidad y contenido de frecuencia de los movimientos del terreno, que hacen vulnerables a los marcos al efecto de una réplica, se ofrece una serie de medidas cuantitativas de los casos en los que la ocurrencia de las réplicas compromete el desempeño estructural y finalmente se evalúa el desempeño de estructuras de múltiples grados de libertad diseñadas a base de marcos de acero.

Unidad de almacenamiento de energía térmica por calor latente, basado en un compuesto de micro-encapsulados de sales solares como materiales de cambio de fase (MCF) en una matriz de concreto.

Ernesto Hernández Cooper, José A. Otero, Rubén D. Santiago Acosta

Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Carr. al Lago de Guadalupe km. 3.5, Estado de México, CP 52926, México

Resumen:

La alta intermitencia de la energía solar representa un problema crítico en la cadena de suministro de energía eléctrica y puede representar un peligro para la estabilidad del sistema eléctrico nacional (SEN) ya que, en los períodos de baja irradiancia solar, el centro nacional de control de energía (CENACE) debe gestionar el respaldo de forma casi instantánea. En las plantas termo-solares, el problema de intermitencia es mitigado a través de unidades de almacenamiento de energía térmica (unidades AET) que constituyen el respaldo para gestionar el suministro de energía termoeléctrica en cualquier momento del día y bajo una demanda del 100%. En este trabajo se propone un tipo de unidad de almacenamiento de energía térmica por calor latente, basado en un compuesto de micro-encapsulados de sales solares como materiales de cambio de fase (MCF) en una matriz de concreto. Contrario a lo que se piensa en MCF confinados, donde el calor latente disminuye con la presión relativa, se encontró que hay una mejora en la densidad de energía volumétrica y gravimétrica del micro-encapsulado. El aumento en la densidad de energía de un MCF confinado, se explica por el aumento en la densidad de calor sensible, producido por la compresibilidad isotérmica de las fases. En aplicaciones de alta temperatura, la densidad de calor sensible domina sobre la densidad de energía absorbida por calor latente. Actualmente, la mayoría de los modelos de PCM confinados asumen fases incompresibles, donde la pérdida de calor sensible bajo confinamiento implica una disminución en la densidad de energía térmica absorbida. El modelo propuesto consiste en un conjunto de ecuaciones para fases compresibles, mediante el cual, se estima el espectro de densidades de energía térmica en los rangos de temperatura de operación de la planta. Finalmente, a través del espectro de energía obtenido, se estiman los costos nivelados de energía de los respaldos basados en MCF para 3, 6, 9 y 12 horas de almacenamiento.

Capacidad de almacenamiento en MPCMs

Rubén D. Santiago Acosta, Ernesto Hernández Cooper, José A. Otero

Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Carr. al Lago de Guadalupe km. 3.5, Estado de México, CP 52926, México

Resumen:

El problema de los procesos de cambio de fase en sistemas confinados para el almacenamiento de energía térmica ha sido investigado extensamente. Se han desarrollado modelos termo-mecánicos para estimar parámetros clave como los tiempos de fusión y la capacidad de almacenamiento de energía de materiales de cambio de fase confinados. Aunque la expansión volumétrica está limitada por la encapsulación, los cambios de densidad durante la fusión afectan significativamente la física del almacenamiento de calor latente. Recientes estudios han demostrado que, dentro del límite incompresible, la presión interna, el calor latente, la densidad de energía y los tiempos de fusión son estimados incorrectamente. Las tasas de fusión están fuertemente influenciadas por la compresibilidad de la fase sólida. En este trabajo, se analizan dos configuraciones de materiales de cambio de fase confinados: sales microencapsuladas en una cáscara con una superficie exterior libre y microcápsulas con una interfaz fija cáscara-matriz. Se ha encontrado que, aunque el calor latente y sensible absorbido disminuye con el grosor de la cáscara, la densidad de energía mejora considerablemente cuando se aplica el modelo propuesto a sales con mayor compresibilidad. Finalmente, se observa que cerca del límite isocórico, los tiempos de fusión aumentan notablemente, revelando una desventaja significativa en sistemas compuestos sal-matriz.

Análisis térmico de un sistema de enfriamiento solar con almacenamiento de energía con cambio de fase y una válvula de templado.

Jesús Cerezo Román

Centro de Investigación en ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

Resumen:

Análisis térmico de un sistema de enfriamiento solar con almacenamiento de energía con cambio de fase y una válvula de templado.

Controlando la estadística de multifotones.

Mario I. Estrada Delgado y Zurika I. Blanco-Garcia

Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Carr. al Lago de Guadalupe Km. 3.5, Atizapán de Zaragoza, 52926, Estado de México, Mexico

Resumen:

Se analiza la acción del operador reportado en [1] sobre los operadores de creación y aniquilación del campo, permitiendo analizar la evolución de estados multipartitas; por ejemplo, estados de Fock en uno o más canales. Con el modelo reportado es posible controlar el estado final de los fotones manipulando los coeficientes de transmisión y reflexión en cada uno de los divisores de haz de la red.

[1] Estrada-Delgado, M.I., Blanco-Garcia, Z. Simulations of quantum walks on beam splitter arrays modeled as higher-order rotations. *Eur. Phys. J. Plus* 139, 261 (2024). <https://doi.org/10.1140/epjp/s13360-024-05050-0>.

Controlabilidad obstaculizada en simplejos bidimensionales

Jorge Becerril

Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Carr. al Lago de Guadalupe Km. 3.5, Atizapán de Zaragoza, 52926, Estado de México, Mexico

Resumen:

En esta plática se hablará del problema de controlabilidad obstaculizada en dos dimensiones. En este problema consideramos una dinámica controlada (dada por una edo) y un simplejo arbitrario bidimensional y, la finalidad, es construir un control tipo feedback para transportar cualquier punto dentro del simplejo al exterior de este, con la restricción adicional que solamente se puede salir de simplejo por una sola de sus caras. Presentaremos condiciones suficientes para la construcción de este tipo de controles y, además, un resultado que permite garantizar la existencia de soluciones.