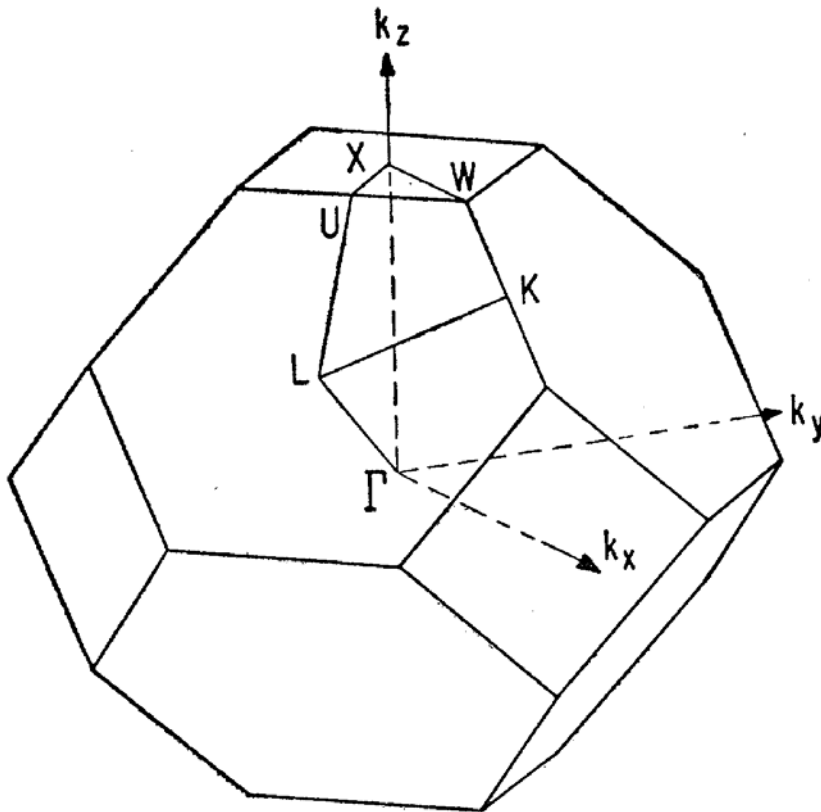




Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Facultad
de Ciencias

Segundo Taller de Física de Materia Condensada y Molecular



Facultad de Ciencias de la UAEM, Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Nota Introductoria

El presente folleto contiene

1. Lista de instituciones organizadoras del Taller.
2. Algunos datos de interés para los participantes del Segundo Taller de Física de Materia Condensada y Molecular de la UAEM
3. Los principales aspectos del Libro o Compendio de Monografías que estamos en condiciones de publicar en el término de un año a partir de las fechas del Taller.
4. El Programa del Taller y
5. Los Resúmenes de los trabajos que se presentarán en el mismo.

Entregaremos certificados de participación a todos los ponentes donde se diga explícitamente su contribución específica al Taller (conferencia, comunicación oral, poster, etc.).

Es importante señalar que pretendemos disminuir al mínimo los protocolos que en ocasiones tienen estas reuniones, en aras de hacer énfasis en crear un clima relajado de amplio intercambio y de disfrute de nuestra profesión.

Para cualquier comentario relativo a estos asuntos, quedamos a la disposición de los participantes.

Dr. Luis Manuel Gaggero (lgaggero@uaem.mx; 7773297000 ext. 3271)

Dr. Miguel Eduardo Mora Ramos (memora@uaem.mx; 7773297000 ext. 3269)

Dr. Rolando Pérez Álvarez (rpa@uaem.mx; 7773297000 ext. 3386)

Dirección postal:

Facultad de Ciencias
Universidad Autónoma del Estado de Morelos
Ave. Universidad 1001
Colonia Chamilpa
CP 62209
Cuernavaca, Morelos, México

Patrocinadores

1. Secretaría Académica UAEM.
2. Cuerpo Académico de Física del Estado Sólido de la UAEM.
3. Cuerpo Académico de Química Cuántica y Física Molecular de la UAEM.
4. Cuerpo Académico de Física Aplicada de la BUAP.
5. Cuerpo Académico de Física del Estado Sólido de la UAZ.
6. Red de Cuerpos Académicos de Física del Estado Sólido.

Datos de interés para los participantes

Desde la Ciudad de México salen autobuses hacia Cuernavaca, al menos desde tres lugares, a saber: la estación de Taxqueña y las dos terminales del aeropuerto internacional de la Ciudad de México. Los autobuses llegan a dos estaciones en Cuernavaca (Cuernavaca Centro o Casino La Selva). Ambas terminales de Cuernavaca se encuentran en lugares con buena comunicación. Desde y hacia la Taxqueña el viaje cuesta unos 70 pesos. Desde y hacia el aeropuerto cuesta 135 pesos.

El Comité Organizador ha sugerido 3 hoteles, a saber:

- **La Casa de Cuernavaca.** Ave Universidad 2000, a 5 minutos a pie del campus Chamilpa. Teléfono 7773135050. Precio aproximado de una habitación sencilla: 300 pesos/noche.
- **GS Cuernavaca.** Carretera México-Cuernavaca km 71.5, muy cerca de la Glorieta Emiliano Zapata, a 10 minutos en carro del campus Chamilpa. Teléfono 7771010590 al 99. La ruta 1 lleva al campus Chamilpa de la UAEM. Precio aproximado de una habitación sencilla: 700 pesos/noche.
- **SPA Posada Tlaltenango.** Priv. Eucalipto No. 77, a 30 metros de la Glorieta de Tlaltenango, a 15 minutos en carro del campus Chamilpa. Teléfono 7773132525. Las rutas 1 y 13 llevan al campus Chamilpa de la UAEM. Precio aproximado de una habitación sencilla: 1,200 pesos/noche.

Usualmente los taxis en Cuernavaca no llevan taxímetro. Se arregla con el chofer un precio, preferentemente antes de abordar el taxi. Como referente se puede decir que del campus de Chamilpa al centro de la ciudad cuesta unos 40 pesos; desde el hotel Tlaltenango son 25-30 pesos; desde el GS Cuernavaca 25 pesos.

Cerca del campus no hay muchos lugares donde comer. El Comité Organizador sugiere **El Guao**, a unos 30 metros del portón principal del campus Chamilpa. El lugar es agradable y la comida sencilla pero buena y barata. A 15 minutos en carro está la Plaza Tlaltenango donde está el hotel del mismo nombre y otros dos restaurantes de platos y precios razonables. En el camino hay otra decena de lugares buenos y de diversos precios.

Algunos detalles organizativos

Las sesiones del Taller tendrán lugar en el Auditorio de la Facultad de Ciencias de la UAEM y en el Salón contiguo al Auditorio. Estos locales quedan en el Edificio B de la Facultad de Ciencias, en el campus principal de la UAEM, en la Colonia Chamilpa.

Los posters se pondrán en el Salón que queda al lado del Auditorio. La idea es que se expongan desde la llegada del autor (preferentemente el lunes) y se quiten al finalizar el Taller (miércoles).

Nota importante: el programa está algo cargado. Hemos seguido las opiniones de los participantes del Primer Taller (enero 2008) en el sentido de condensar el Taller en tres días. Rogamos a todos un esfuerzo en la dirección de cumplir con los horarios.

Opciones de publicación

Hemos recibido varias ofertas para publicar un libro de monografías en editoriales de Estados Unidos de América. Los interesados en publicar sendas monografías, deben contactar a Gaggero, Mora o Rolando. Durante el Taller tendremos una reunión para coordinar los esfuerzos. Preliminarmente la idea es tener estos materiales a finales de 2009. La **UAEM** por su parte saca todos los años convocatorias que ofrecen financiamiento para publicar libros.

Otra opción:

Rolando es el Director fundador de la revista electrónica ***Nova Scientia*** que publica la Universidad de La Salle Bajío. Ver sitio http://nova_scientia.delasalle.edu.mx/. En ***Nova Scientia*** se ha establecido un sistema doble ciego de arbitraje con un adjudicador en caso de desacuerdo entre los dos evaluadores de un trabajo y el Consejo Editorial como órgano definitorio de cualquier controversia que no tenga solución con los dos árbitros y el adjudicador. Está previsto que esta revista sea incluida en varios Índices al salir el segundo número (mayo 2009) y en otros más conocidos a medida que vaya teniendo 2 o 3 años de antigüedad. Los trabajos del Taller se pueden publicar en ***Nova Scientia*** previo el arbitraje que corresponda.

Programa

Hora	Nombre		Título	Lugar
Lunes 12 de enero. Preside: Luis M. Gaggero				
10:00			Breve Inauguración	Auditorio
10:15	Víctor Velasco	ICMM, España	Una visión de las propiedades físicas de sistemas aperiódicos	Auditorio
11:15	Antonio Méndez Blas	BUAP	Espectroscopia óptica de Lantánidos y aplicaciones	Auditorio
12:15	P. Pereyra, V.G. Ibarra-Sierra and J.L. Cardoso	UAM	Homogeneous magnetic superlattices and the spin dynamics in the presence of Rashba and Dresselhaus interaction	Auditorio
13:15	Rafael Baquero Parra	CINVESTAV-DF	Novedades en el Campo de la Superconductividad	Auditorio
Lunes 12 de enero. Preside: Jesús Arriaga				
11:15	Ernesto Marín Moares	CICATA-IPN	Transferencia de calor en presencia de fuentes periódicas: Ondas térmicas y técnicas fototérmicas	Salón
12:15	Edilso Reguera	CICATA-IPN	Almacenamiento de hidrógeno en nanocavidades	Salón
13:15	Carlos Rodríguez Castellanos	UH, Cuba	Modelo de gas en la red para la adsorción de Hidrógeno en Hexacianometalatos	Salón

Hora	Nombre		Título	Lugar
Martes 13 de enero. Preside: Miguel E. Mora				
10:00	Ramón Hernández Lamonedá	UAEM	Estructura electrónica, propiedades espectroscópicas y dinámicas en interacciones débiles: de cúmulos a fases condensadas. $X_2-(H_2O)_n$ (X=Cl, Br)	Auditorio
11:00	Nina Pastor Colón	UAEM	Origami molecular: el plegamiento de proteínas y lo que ocurre cuando sale mal	Auditorio
12:00	Claudio Zicovich, Ma Luisa San Román y Alejandro Ramírez Solís	UAEM	Efectos directores de la estructura en la síntesis de zeolitas. Estudios periódicos B3LYP	Auditorio
13:00	Alejandro Ramírez Solís	UAEM	Espectroscopia teórica del Bromuro de Plata. Un estudio CASSCF+ACPF de los siete estados electrónicos mas bajos	Auditorio
Martes 13 de enero. Preside: Víctor Velasco				
10:00	Guillermo Monsivais Galindo	UNAM	Resonancias gigantes	Salón
11:00	D. A. Contreras-Solorio, X. I. Saldaña, I. Rodríguez-Vargas, and J. Madrigal-Melchor	UAZ	Optical reflectance of a deterministic aperiodic multilayer structure including left-handed materials	Salón
12:00	Jesús Arriaga	BUAP	Homogeneización de cristales fotónicos	Salón
13:00	Stoyan Vlaev	UAZ	Densidad de estados integrada en heteroestructuras planares simples	Salón

Hora	Nombre		Título	Lugar
Miércoles 14 de enero. Preside: Armando Contreras				
10:00	Gerardo García Naumis	UNAM	Ecuaciones relativistas en nanotecnología: grafeno	Auditorio
11:00	Juan Carlos Martínez Orozco	UAZ	Transistores Efecto de Campo: Estudio de algunas de sus propiedades	Auditorio
12:00	Arezky Hernández Rodríguez	UACM	Symmetries and dynamics in an AC-driven self-assembled quantum dot lens	Auditorio
13:00	Gerardo García Naumis	UNAM	Formación de vidrios y modos vibracionales de baja frecuencia.	Auditorio
Miércoles 14 de enero. Preside: Stoyan Vlaev				
10:00	L. Ponce, M. Arronte, E. de Posada, T. Flores	CICATA-IPN-Altamira	La ablación láser para el desespinado de Nopal: En la frontera de la física y tecnología	Salón
11:00	L. Ponce, M. Arronte, E. de Posada, T. Flores	CICATA-IPN-Altamira	Espectroscopia de plasmas inducidos por láser en régimen multipulso	Salón
12:00	J.J. Reyes Salgado, Elías López-Cruz y Antonio Méndez Blas	BUAP	Medición de reflectividad de Espejos de Bragg de Silicio Poroso	Salón
13:00	Guillermo Santana	UNAM	Emisores transparentes de silicio polimorfo nanoestructurado para ser utilizado en celdas solares de silicio cristalino	Salón

CONFERENCIAS

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Una visión de las propiedades físicas de sistemas aperiódicos

V. R. Velasco

Instituto de Ciencia de Materiales de Madrid, CSIC,
Sor Juana Inés de la Cruz 3, Cantoblanco, 28049 Madrid

RESUMEN

Los sistemas aperiódicos se pueden considerar como materiales intermedios entre los sistemas periódicos (cristales) y los sistemas desordenados. Presentaremos aquí una visión de algunas propiedades electrónicas, vibracionales y electromagnéticas de sistemas aperiódicos de diversos tipos (Fibonacci, Thue-Morse, Rudin-Shapiro, Period-Doubling) así como de su combinación con sistemas periódicos. Veremos que las propiedades vibracionales y electromagnéticas presentan resultados novedosos asociados a confinamiento selectivo, guiado y filtrado de ondas. La combinación de sistemas aperiódicos con sistemas periódicos permite obtener fenómenos análogos a los que se observan en cavidades acústicas u ópticas en superredes. Aparte de esta novedad el confinamiento selectivo de los modos para diversos rangos de frecuencia en las diferentes partes de la estructura supone un rasgo distintivo de estos sistemas.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Espectroscopia óptica de Lantánidos y aplicaciones

Antonio Méndez Blas

Instituto de Física. Benemérita Universidad Autónoma de Puebla

RESUMEN

En este trabajo se pretende mostrar algunos aspectos interesantes del grupo de elementos llamados lantánidos (3+), de los cuales los mas populares son el Neodimio y recientemente el Erblio. Se muestran además, algunos resultados de espectroscopia de absorción óptica polarizada y fotoluminiscencia, así como la importancia de la interpretación de los datos obtenidos y su relación con el entorno del material que los contenga.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Homogeneous magnetic superlattices and the spin dynamics in the presence of Rashba and Dresselhaus interactions

P. Pereyra, V.G. Ibarra-Sierra and J.L. Cardoso

ppereyra@correo.azc.uam.mx; jicc@correo.azc.uam.mx

Física Teórica y Materia Condensada, UAM-Azcapotzalco, México D. F. México

RESUMEN

We present and discuss analytical solutions of Pauli's equation for spin 1/2 charge carriers moving through a homogeneous magnetic superlattice¹ in the presence of Rashba and Dresselhaus interactions. We discuss the advantage of using homogeneous magnetic superlattices, instead of the widely used diluted magnetic superlattices. Varying the tilting angle of the magnetic field strength, we control at will the spin dynamics of this system. We discuss the physical conditions for highly efficient spin-filter and spin-inversion devices². We study the space-time evolution of Gaussian spin wave packets inside and outside of the homogeneous magnetic. We discuss interfering processes of spin wave packets, defined in the band gap and in the resonant energy regions of a homogeneous magnetic superlattice based on an InSb semiconductor. We show also that the time spent inside the magnetic superlattice is in good agreement with the phase time predictions.

1. Cardoso J. L., Pereyra P. and Anzaldo-Meneses A, Phys. Rev. B **63** (2001) 153301.
2. Cardoso J. L. and Pereyra P. EuroPhys. Letts. **83** (2008) 38001

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Novedades en el Campo de la Superconductividad

R. Baquero

Departamento de Física, CINVESTAV

rbaquero@fis.cinvestav.mx

RESUMEN

Uno de los avances recientes más impactantes en el campo de la superconductividad, ha sido la posibilidad de calcular, desde primeros principios la temperatura crítica, T_c , a la cual ocurre la transición de fase en diversos materiales. No existía, nunca existió, una ecuación que predijese realmente la T_c . El impacto de este nuevo trabajo es enorme ya que permite, en principio, la predicción teórica de nuevos materiales superconductores. El problema de los superconductores de alta T_c actualmente existentes y que ya han sido reportados hasta los 200K (superconductors.org) tienen serios problemas mecánicos y su uso en la tecnología es aun dudoso. Pero la predicción de T_c permite abrigar la esperanza seria de poder explorar teóricamente, nuevos materiales, totalmente diferentes, y con características mecánicas adecuadas para las aplicaciones tecnológicas. En este seminario describiré la situación anterior para poner en perspectiva el avance nuevo.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Transferencia de calor en presencia de fuentes periódicas: Ondas térmicas y técnicas fototérmicas.

Dr. Ernesto Marín Moares

*Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada
Inst. Politécnico Nacional Legaria 694, Col. Irrigación, C.P. 11500, México D.F.
emarin63@yahoo.es*

RESUMEN

Se discutirá el papel que juegan los parámetros termofísicos en la transferencia de calor en sólidos en presencia de fuentes variables en el tiempo. Partiendo de las ecuaciones que gobiernan el transporte de calor en condiciones estáticas, estacionarias y no estacionarias, se hará énfasis en el fenómeno de la difusión de calor en presencia de fuentes periódicas, y en la aplicación del modelo de ondas térmicas para la interpretación de resultados en experimentos fototérmicos. Se discutirán algunas aplicaciones recientes de este modelo para la medición de parámetros de transporte y para la explicación de algunas peculiaridades aparentemente anómalas de los resultados de experimentos fototérmicos en sistemas multicapas.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Almacenamiento de H₂ en Nanocavidades

E. Reguera

Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada del IPN, Unidad Legarí, Legarí 694, México, D.F.; e Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana, Cuba. Email: erequera@yahoo.com

RESUMEN

El desarrollo de la civilización humana está íntimamente ligado a la disponibilidad de energía. De hecho, la gran aceleración del desarrollo de nuestra civilización ocurrió como resultado del descubrimiento e industrialización de los combustibles fósiles. Estos combustibles, como todas las fuentes de energía disponibles en la naturaleza tienen origen solar. Ello explica que cuando se busca una futura fuente de energía, renovable, como potencial sustituto de los combustibles fósiles, perecederos, la primera mirada se oriente al aprovechamiento de la energía solar pero de una forma mucho más eficiente que lo logrado por la naturaleza. La energía solar que la naturaleza acumuló durante millones de años en forma de combustibles fósiles, la especie humana la agotará en apenas tres siglos. Cuando se considera el aprovechamiento directo de una fracción de la energía solar que llega a la tierra surge de inmediato la necesidad de encontrar un portador secundario de energía no contaminante que sustituya a las gasolinas en el transporte automotor, por ejemplo, o como forma de almacenarla. El candidato natural es el hidrógeno por su elevada energía de combustión (572 kJ/mol) (tres veces el de las gasolinas) y la generación de un subproducto no contaminante (agua). Tal potencialidad plantea tres retos: producirlo, almacenarlo y usarlo de forma eficiente. Sin dudas, el mayor de ellos se refiere al almacenamiento. El H₂ puede mantenerse en estado líquido solo por debajo de 32.7 K (su temperatura crítica), independientemente de la presión aplicada, y llevarlo al estado líquido conlleva invertir un 40% de la energía a generar. El almacenamiento en recipientes a altas presiones tampoco parece ser una opción viable. Para una presión de 345 atm se logra una densidad de 15 g/L, muy inferior a los 72 g/L correspondiente al estado líquido. Una de las alternativas que se estudian al respecto del almacenamiento, es el empleo de la adsorción física en materiales porosos ligeros. La idea central aquí es lograr que la interacción de la molécula H₂ con la superficie de la cavidad sea mucho más fuerte que la observada para H₂-H₂ en el estado líquido, la cual es debida a interacciones tipo van der Waals. Plantearse tal posibilidad nos lleva a preguntarnos, cuales son las propiedades de la molécula de hidrógeno y cuál es la naturaleza de las interacciones en que ella puede participar con la superficie de un sólido?. Las respuestas a esas interrogantes nos conducen directamente a pensar en la posibilidad de diseñar sólidos porosos ligeros para potenciar esas interacciones. Esta conferencia se inserta en ese contexto e intenta dar respuesta al alcance de las interacciones H₂-superficie de un sólido para lograr niveles de almacenamiento de H₂ en nanocavidades que satisfagan los requerimientos tecnológicos. Los resultados a exponer se pueden encontrar en los siguientes artículos:

1. L. Reguera, J. Balmaseda, L.F. del Castillo, E. Reguera, *J. Phys. Chem. C*, 112 (2008), 5589-5597
2. L. Reguera, J. Balmaseda, C.P. Krap, E. Reguera, *J. Phys. Chem. C*, 112 (2008), 10490-10501
3. L. Reguera, C.P. Krap, J. Balmaseda, E. Reguera, *J. Phys. Chem. C*, 112 (2008), 15893-15899
4. L. Reguera, J. Balmaseda, M. Avila, E. Reguera, *J. Phys. Chem. C*, 112 (2008), 17443-17449
5. M. Avila, L. Reguera, J. Rodríguez-Hernández, J. Balmaseda, E. Reguera, *J. Solid State Chem.* 181 (2008), 2899-2907

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Modelo de gas en la red para la adsorción de Hidrógeno en hexacianometalatos

Dr. Carlos Rodríguez Castellanos
Universidad de La Habana

RESUMEN

Los hexacianometalatos $Zn_3[Co(CN)_6]_2$ y $Zn_3A_2[Fe(CN)_6]_2$, con $A = Na, K, Rb, Cs$, son una familia de compuestos que sirven de modelo para estudiar la adsorción y difusión de H_2 en sólidos cristalinos nanoporosos. Las principales regularidades encontradas experimentalmente pueden comprenderse en el marco de un modelo generalizado de gas reticular, cuyos parámetros tienen un claro sentido físico, consistente con la información microscópica disponible, y cuyos valores varían según el tipo de catión A^+ presente en las cavidades. Se resuelve la ecuación de movimiento para la función de Green de una partícula en la aproximación del campo medio y se obtiene la energía de los estados que ocupan las moléculas adsorbidas. El recubrimiento y el calor de adsorción calculados se comparan con los resultados experimentales.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Estructura electrónica, propiedades espectroscópicas y dinámicas en interacciones débiles: de cúmulos a fases condensadas $X_2-(H_2O)_n$ ($X=Cl, Br$)

Ramón Hernández Lamoneda

Centro de Investigaciones Químicas, UAEMor, México

RESUMEN

En este seminario presentare cálculos ab initio de los potenciales de interacción en dos sistemas de nuestro interés reciente: interacción de la molécula de NO con gases nobles y la de moléculas de halógeno X_2 ($X=Cl, Br$) con agua. La motivación de estos estudios proviene de dar sustento teórico a trabajo experimental de espectroscopia electrónica y vibracional tanto en cúmulos en fase gas como en fases condensadas. En el caso del agua existe información para los llamados clatratos de halógeno. Este tipo de sistema ha cobrado especial relevancia dado que el mayor depósito natural de metano se encuentra en forma de clatratos en los océanos. El análisis de los espectros permite obtener información detallada de las interacciones anfitrión-huésped y su modificación al pasar de la fase gas a distintas fases condensadas tanto para el estado fundamental como los estados electrónicos excitados. Una de las interrogantes a discutir es como realizar la conexión entre la información obtenida en cálculos muy detallados en cúmulos a la representación de las interacciones en las fases condensadas.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Origami molecular: el plegamiento de proteínas y lo que ocurre cuando sale mal

Nina Pastor

Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma del Estado de Morelos

RESUMEN

Las proteínas son polímeros lineales, hechos de 20 monómeros distintos con secuencias no triviales, y con longitudes que van típicamente desde los 50 hasta poco más de 27000 monómeros. La función de las proteínas en un organismo depende obligatoriamente del plegamiento del polímero en el espacio, y éste suele ser único, en contraste con el comportamiento estadístico de homo y heteropolímeros comúnmente estudiados en física estadística. El entender como una cadena con muchos grados de libertad rotacional adquiere robusta, rápida y reproduciblemente una conformación estable y funcional ha mantenido ocupados a biólogos, químicos, físicos y computólogos. Presento un panorama de las herramientas conceptuales, computacionales y experimentales que se aplican a la resolución del problema del plegamiento de las proteínas. Esta información es útil para entender enfermedades degenerativas conocidas como "enfermedades de plegamiento", en las cuales proteínas clave para la función celular adquieren conformaciones que las hacen proclives a formar fibras, como las que caracterizan las encefalopatías tipo Alzheimer o la enfermedad de las vacas locas.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Efectos directores de la estructura en la síntesis de zeolitas. Estudios periódicos B3LYP.

**Claudio M. Zicovich-Wilson^{a*}, Ma. Luisa San Román^b,
Alejandro Ramírez-Solís,^a**

^a Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av
Universidad 1001, C. Chamilpa, 62209 Cuernavaca(MOR), México.

^b Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de
Morelos. Av Universidad 1001, C. Chamilpa, 62209 Cuernavaca(MOR), México.

*Correo-e: claudio@servm.fc.uaem.mx

RESUMEN

La síntesis dirigida de materiales porosos, y en particular de zeolitas, es uno de los grandes desafíos tecnológicos de estos tiempos. Mediante estas técnicas es posible producir materiales con propiedades óptimas para intervenir, sea como catalizadores o como tamices moleculares, en procesos industriales de alto interés como son aquellos de la petroquímica o la química fina, entre otras. Sin embargo, hasta el momento los fenómenos que dirigen las síntesis hacia la formación de determinados tipos de estructuras son bastante poco comprendidos, siendo por tanto difícil predecir con mínima fiabilidad las condiciones necesarias para obtener materiales con las características deseadas. En este trabajo se presentarán estudios recientes que proporcionan información teórica a nivel microscópico de algunos de los fenómenos involucrados en la interacción entre la red y diversas especies ocluidas que dirigen la síntesis hacia la formación de determinadas estructuras zeolíticas. Los cálculos correspondientes se realizaron sobre modelos periódicos con el programa CRYSTAL06[1] para el cálculo de la estructura electrónica, utilizando la teoría del Funcional de la Densidad en su variante híbrida B3LYP.[2]

[1] Dovesi, R.; Saunders, V. R.; Roetti, C.; Orlando, R.; Zicovich-Wilson, C. M.; Pascale, F.; Civalieri, B.; Doll, K.; Harrison, N. M.; Bush, I. J.; Arco, P. D.; Llunell, M., *CRYSTAL06 Users Manual*, University of Turin: Turin **2006**, see <http://www.crystal.unito.it>.

[2] Becke, A. D., *J. Chem. Phys.* **1993**, 98(7), 5648.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Espectroscopia teórica del Bromuro de Plata. Un estudio CASSCF+ACPF de los siete estados electrónicos mas bajos

Jorge Iván Amaro Estrada y Alejandro Ramírez-Solís

Departamento de Física
Facultad de Ciencias, UAEM

RESUMEN

Las propiedades espectroscópicas básicas de los primeros siete estados electrónicos de la molécula de AgBr han sido estudiadas con métodos variacionales a nivel Complete Active Space SCF y Averaged Coupled Pair Functional(CASSCF) usando pseudopotenciales relativistas y bases atómicas gaussianas optimizadas para reproducir los espectros de ambos átomos y los iones Ag^+ y Br^- . Se han incluido en el CAS los 11 ($4d^{10}5s^15p^0$) electrones de valencia de la plata y los $4p^5$ del bromo produciendo funciones de onda ASSCF(16,12) de referencia que generan espacios variacionales de 8×10^{10} CSF. Se discute en detalle la importancia de calibrar las bases atómicas para reproducir las posiciones de las asíntotas neutras e iónicas que correlacionan adiabáticamente con los estados excitados de la plata dada la presencia de cruces evitados en la región Franck-Condon de esta molécula. Se comparan nuestros resultados con los reportados previamente por Guichemerre *et al.* a nivel ACPF en el cual usan espacios CASSCF(16,10) mucho mas restringidos y que no reproducen las asíntotas que correlacionan con el estado de Rydberg

$\text{Ag}(^2P: 4d^{10}5s^05p^1) + \text{Br}(^2P)$.

**II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
DE LA UAEM**

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Resonancias gigantes

Guillermo Monsiváis
Instituto de Física. UNAM. México

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Optical reflectance of a deterministic aperiodic multilayer structure with right and left-handed

D. A. Contreras-Solorio¹, X. I. Saldaña², I. Rodríguez-Vargas¹,
and J. Madrigal-Melchor¹

¹ Escuela de Física de la Universidad Autónoma de Zacatecas, Apartado Postal C-580, 98060 Zacatecas, Zac.

² Instituto de Física de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, Pue.

* dacs10@yahoo.com.mx

RESUMEN

We study theoretically the transmission properties of a multilayer structure formed by cells, where one cell is made of two layers: the first one with a material with positive refraction and the second one is made of a material with negative refraction. The positive refractive index is modulated by a deterministic self-similar numerical sequence named "The 1's-counting sequence". The negative refractive index is given by a dispersion model. We study the frequency and angular dependence of the reflectance for the structure, for both polarizations TE and TM. In our results, a structure which only has layers with positive refractive index following the self-similar 1's-counting sequence, shows clearly self-similarity in the spectrum of reflectance. A structure where the refractive index of the layers with negative refraction is dispersionless, and the average refractive index of the structure is zero, is a perfect mirror, irrespective of frequency, polarization, and angle of incidence. If the negative refraction index presents dispersion, the behavior of the structure as a perfect mirror, disappears. However, in this case, the structure presents partially a behavior of omnidirectional reflector for an interval of frequencies. In the calculations, we use the transfer matrix method.

**II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
DE LA UAEM**

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Homogeneización de cristales fotónicos

Jesús Arriaga
Instituto de Física. BUAP. México

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Densidad de estados integrada en heteroestructuras planares simples

S. J. Vlaev

*Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas
Calzada Solidaridad Esquina con Paseo La Bufa s/n, C.P. 98060
Zacatecas, ZAC., México
stoyanv52@yahoo.com*

RESUMEN

La estructura electrónica de los pozos y las barreras cuánticos rectangulares ha sido estudiada principalmente en puntos de alta simetría de la zona de Brillouin bidimensional. Esto se debe al hecho que las aplicaciones de las heteroestructuras planares se basan en primer lugar en las transiciones ópticas entre estados ligados alrededor de estos puntos. Sin embargo, todas las propiedades macroscópicas de los pozos y las barreras cuánticos dependen de la densidad de estados integrada del sistema. Los métodos fotoemisión y fotoemisión inversa pueden medir esta cantidad en átomos, moléculas, cristales y nanoestructuras. Los datos experimentales y teóricos para la densidad de estados integrada en heteroestructuras planares simples son escasos. En este trabajo presentamos cálculos numéricos para la densidad de estados integrada en pozos y barreras cuánticos rectangulares. La integración en la zona de Brillouin bidimensional realizamos aplicando el método de puntos especiales sumando en 10, 36, 136, 528 y 2080 puntos de la zona. Encontramos las condiciones para la formación de pozos y barreras cuánticos en términos de las densidades de estados integradas. Estudiamos las características específicas del espectro electrónico de los sistemas bidimensionales.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Ecuaciones relativistas en nanotecnología: grafeno

Gerardo García Naumis

Instituto de Física. Universidad Nacional Autónoma de México

RESUMEN

En esta plática hablaremos de las importantes propiedades físicas y químicas del grafeno, las cuales lo hacen el candidato ideal para sustituir al Silicio en la electrónica. Además, los electrones en este material se comportan como partículas relativistas con masa nula, siendo descritas por la ecuación de Dirac. Presentaremos un estudio del comportamiento del grafeno bajo radiación electromagnética, mostrando que existen importantes efectos no-lineales así como la apertura de una brecha energética.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Transistores de efecto de campo: Estudio de algunas de sus propiedades

Juan Carlos Martínez Orozco

*Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas
Calzada Solidaridad Esquina con Paseo La Bufa s/n, C.P. 98060
Zacatecas, ZAC., México*

El transistor, inventado hace poco más de 60 años, es un elemento clave en el mundo digital de hoy día, y tal vez el invento más importante del siglo XX. Desde su invención en 1947 este dispositivo ha experimentado muchas mejoras en cuanto a diseño se refiere y también con respecto a sus propiedades. Estas mejoras están basadas por un lado en los nuevos materiales y en el avance de técnicas de crecimiento que dan lugar a ellos y por otro lado en las diferentes estructuras semiconductoras empleadas en su diseño, una de estas estructuras semiconductoras empleadas con el afán de mejorar las propiedades de los transistores y en particular de los transistores efecto de campo (FET) son los pozos δ -dopados de impurezas, de manera tal que nace lo que se conoce como el transistor efecto de campo con dopaje tipo delta (δ -FET). En esta ocasión presentamos una serie de resultados que se obtienen del estudio de estos sistemas en dos materiales semiconductores (Si y GaAs). Basándonos en un modelo sencillo estudiamos algunas de sus propiedades electrónicas tanto en la aproximación de función envolvente (EFA) como en la aproximación de enlace fuerte (Tight-binding).

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Symmetries and dynamics in an AC-driven self-assembled quantum dot lens

Arezky H. Rodriguez

Universidad Autónoma de la Ciudad de México

Lilia Meza-Montes

Universidad Autónoma de Puebla

Carlos Trallero-Giner

Universidad de la Habana

Sergio E. Ulloa

Ohio University

RESUMEN

There is intense activity on the experimental and theoretical understanding of the dynamical evolution of quantum systems exposed to strong time-dependent external fields. The topic has acquired further relevance in connection with the practical operation of devices subjected to oscillating electrical and magnetic fields at the nanoscale. Examples include the shift of resonances in heterostructures as ac-fields are applied (the ac-Stark effect), the behavior of electronic bands in spatially periodic systems, and the production of currents in an ac-driven quantum dot. One important effect in these systems is the strong dynamical suppression of tunneling at suitable values of applied ac-field. The coherent destruction of tunneling that appears, known as dynamical localization in the literature, has been well studied in two-level systems as coming from the destructive interference introduced by the drive, whenever there is a crossing of quasi-energy levels in the spectrum. Dynamical localization has been proposed as a tool to control the spatial location of a particle in a two-well potential, and to selectively control the tunneling in a multiple-well system [1]. Typical growing conditions of semiconducting quantum dots result in dots with lens geometry, and an analysis of this spatial symmetry on the electronic structure is of interest [2]. In this work we explore the problem of periodic force driving and dynamical localization in a realistic level structure that describes self-assembled quantum dots in semiconductors. This requires that we extend the Floquet formalism to self-assembled quantum dots with lens shape; we also analyze the convergence properties of the basic expansion used in the description of the Floquet states and establish the importance of incorporating the multi-level structure of a real system; we provide a detailed description of the dynamical symmetry properties of states for the two orthogonal directions of the driving electric field; and finally, we identify in this complex level structure the conditions for dynamical localization. We find the realistic lens shape to be crucial in the description of the dynamics, as the spatial non-separability of the state plays a relevant role for different field orientations. Consideration of the multilevel structure present in typical quantum dots is a vital requirement for the correct description of the dynamical response of carriers. It is essential to go well beyond the consideration of only two active levels to fully describe the Floquet quasi-energy and the time evolution of electrons in realistic quantum dots. Even for weak driving forces or frequencies, the description of the dynamics requires the inclusion of many different states in order to achieve a fully converged description of the time evolution. The quantum lens geometry makes for a complex and rich theoretical description of the problem. Interestingly, we show that the real dot system allows the generation of higher harmonics of the driving frequency, with intensity that is fully dependent on the amplitude of the drive, which could be used for its generation. The phenomenon of dynamical localization is shown to remain for suitable values of driving field, with strongly diminished localization.

[1] J.M. Villas-Boas, S. E. Ulloa, and N. Studart, Selective coherent destruction of tunneling in a quantum-dot array, *Phys. Rev. B* **70**, 041302 (2004).

[2] A. H. Rodríguez, C. Trallero-Giner, S. E. Ulloa, and J. Marín –Antuña, Electronic states in a quantum lens, *Phys. Rev. B* **63**, 125319 (2001).

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Formación de vidrios y modos vibracionales de baja frecuencia

Gerardo García Naumis

Instituto de Física. Universidad Nacional Autónoma de México

RESUMEN

Uno de los problemas más complicados de la física contemporánea, es la formación de vidrios. Existen diversas teorías, pero pocas dan importancia al hecho de que todos los vidrios tienen un exceso de modos vibracionales de baja frecuencia. En esta plática haremos una revisión del problema, y mostraremos como estos modos son fundamentales para entender los efectos del dopaje químico. Para ello introduciremos la teoría de la rigidez, aplicada por los ingenieros para entender la estabilidad mecánica de estructuras.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

La ablación láser para el desespinado de Nopal: En la frontera de la física y tecnología.

L. Ponce, M. Arronte, E. de Posada, T. Flores
CICATA-IPN, Unidad Altamira
lponce@ipn.mx

RESUMEN

La ablación láser ha demostrado ser la técnica ideal para lograr el desespinado de nopal evitando las pérdidas de volumen útil y aumentando la vida de anaquel del producto, aspectos que son problemáticos al utilizar las técnicas convencionales. El nuevo método desarrollado, implica el uso de pulsos láser de alta intensidad, cuya absorción se produce de forma selectiva en las areolas sin afectar la corteza. En este proyecto, que inicia con el estudio de los mecanismos de ablación y llega hasta el desarrollo de una nueva máquina, se demuestra la necesidad del empleo de dos técnicas de monitoreo espectral: La primera es la conocida como LIBS-Laser Induced Breakdown Spectroscopy, que se reporta por primera vez con el empleo de una fuente láser de excitación en el rango de microsegundos; y la segunda es una nueva modalidad de fotoacústica que denominamos PILA-Photoacoustic Induced by Laser Ablation, donde se monitorea la señal acústica generada por la onda de choque que se produce durante la ablación láser. Es muestran los resultados obtenidos por ambas técnicas en lograr la mejor comprensión de los mecanismos de ablación de areolas, así como para monitorear el proceso en tiempo real.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Espectroscopia de plasmas inducidos por láser en régimen multipulso

L. Ponce, M. Arronte, E. de Posada, T. Flores.

CICATA-IPN, Altamira
lponce@ipn.mx

RESUMEN

La espectroscopia de ruptura de plasmas inducidos por láser (LIBS- Laser Induced Breakdown Spectroscopy), es una poderosa técnica de análisis que se ha desarrollado con fuerza en los últimos años. Sus ventajas mas evidentes son la portabilidad, no exigencia de preparación de muestras, mínima afectación al producto y posibilidad de análisis en tiempo real. Existen diversas modalidades de aplicación, desde la mas extendida que utiliza monopolos láser de elevada potencia pico, los doble pulsos, o el análisis en vacío. En el seminario, presentamos la aportación de un nuevo método de excitación que maneja el pulso láser como un tren de pulsos con separación entre pulsos de unos pocos microsegundos. Se discuten los mecanismos físicos que permiten que este nuevo método mejore drásticamente la intensidad de la emisión de plasma y la relación señal-ruido. Se muestran resultados de la aplicación de la excitación del multipulso en el microanálisis para determinación elemental en piel humana, nopal, aceros y otras muestras. Se presenta el equipo MicroLIBS desarrollado como alternativa compacta y de bajo costo para el análisis de campo mediante la técnica LIBS.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Medición de reflectividad de Espejos de Bragg de Silicio Poroso

J.J. Reyes Salgado^a, Elías López-Cruz^{**} y Antonio Méndez Blas

Instituto de Física de la BUAP

RESUMEN

Mediante un espectrómetro no comercial se midió la reflectividad en espejos de Bragg obtenidos a partir de multicapas de silicio poroso (PS) en diferentes regiones espectrales. El silicio poroso se obtiene por anodizado electroquímico de una oblea de Si monocristalino, al ser atacado por ácido fluorhídrico. Dependiendo de las distintas escalas y características de la estructura porosa, y según el tamaño de los poros mostró propiedades morfológicas, electrónicas y ópticas diferentes. Los espejos de Bragg caracterizados tienen del orden 10 capas de crecimiento. Estos espejos tienen la ventaja de ser baratos y de fabricación rápida. El espectrómetro de bajo costo y fácil empleo utiliza una cámara CCD, consiste en una fibra óptica, que capta la luz que incide sobre la red de difracción. Esta red se encuentra inclinada respecto a la dirección de incidencia de la luz de la fibra óptica y en frente se coloca una cámara CCD. Debido a las características de la red el espectrómetro sólo sirve para el rango visible (400 nm – 650 nm). Se realizó una calibración estándar empleando una lámpara de mercurio. Además se diseñó un software en Matlab que permite guardar y graficar el espectro y la reflectividad.

* Trabajo parcialmente apoyado por CONACyT, y PROMEP.

a) Estudiante de Doctorado del IFUAP

** Dirección electrónica: elopez@sirio.ifuap.buap.mx

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Emisores transparentes de silicio polimorfo nanoestructurado para ser utilizado en celdas solares de silicio cristalino

Guillermo Santana Rodríguez

Instituto de Investigaciones en Materiales
Universidad Nacional Autónoma de México, Coyoacán, México D.F., CP 05410
gsantana@iim.unam.mx

RESUMEN

A partir de la descomposición de Diclorosilano (SiH_2Cl_2) ó Tetracloruro de Silicio (SiCl_4), Hidrógeno (H_2) y Argón (Ar) en un sistema de plasma directo (PECVD), y bajo condiciones específicas de presión, relación de flujos de gases, temperatura del sustrato y potencia de radio frecuencia (RF); se pueden obtener altas densidades de nanocristales de silicio con tamaños promedios entre 1 y 2 nanómetros. La utilización de compuestos clorados en los sistemas de PECVD facilita la formación y cristalinidad de nanoestructuras de silicio que quedan encerradas en una matriz de silicio amorfo, sin necesidad de realizar tratamiento térmicos complejos a altas temperaturas. La combinación de pequeños nanocristales de silicio y del silicio amorfo que los rodea, da como resultado un material con un ancho de banda prohibida efectivo (gap efectivo) que varía entre 1.8 y 2.3 eV. Este material polimorfo nanoestructurado es fácilmente dopado con fósforo para incrementar su conductividad tipo n o con Boro para hacerlo tipo p. Lo anterior convierte a este material en un fuerte candidato para ser utilizado como emisor en celdas solares de silicio, lo cual garantiza un aumento considerable de la respuesta espectral de las celdas solares de silicio cristalino en la región de longitudes de onda corta, garantizando también de esta forma altos voltajes de circuito abierto. Otro efecto esperado es el de Down Conversion por efecto de confinamiento cuántico en los nanocristales de silicio embebidos en la matriz de silicio amorfo y la producción de fotones de menor energía a partir de la absorción de la parte del espectro ultravioleta.

CARTELES

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Time-Energy Uncertainty Relation applicability for quantum transport of spin-related wave packets

G. Bonfanti-Escalera

Dep. de Física y Matemáticas, Univ. Iberoamericana C.P.01219, D.F. México.

L. Diago-Cisneros

Dep. de Física Aplicada, Facultad de Física, Universidad de La Habana
C.P. 10400, Cuba

RESUMEN

In this report we are concerned to study the quantum transport of charge carriers for low dimensional systems with spin-orbit coupling by means of Heisenberg's inequalities. To develop our analysis, an accurate Gedanken experiment was carefully put together, mainly based on the spin field effect transistor phenomenology and taking into account several wide accepted approaches on quantum mechanical limited determinism [1, 2]. While verifying the applicability of time-energy uncertainty relation (TEUR) during electronic wave packet's evolution through a semiconductor quantum wire, some qualitative information related the dynamic behavior of the system is found. We have solve the Schrödinger equation with spin-related coupling of Rashba-type [3] to obtain expected individual values of energy and then apply the corresponding TEUR. The problem is also approached in the framework of the stationary phase method [4] to guarantee robust coherence for wave packet's evolution, which lately implies certain restrictions on the incident energy (E) values for both tunneled ($E < \text{barrier's height}$) and transmitted ($E > \text{barrier's height}$) cases. The stationary phase method's advantages and applicability to quantum transport have recently attracted attention [5, 6]. Tailoring different input parameters such as: incoming particles spin polarization, barrier thickness, (Rashba or Dresselhaus) spin-orbit interaction strength and potential barrier oscillations, we have observed appealing effects while the packet evolves through a quasi-1D heterostructure. Hopefully some of them could be of help in spintronic device designing. We have obtained most of the numerical simulation results, within the so-called conservation zone. However, for certain barrier thicknesses, some values drop into the forbidden area regarding the clear theoretical limit imposed by the TEUR. As an expected bonus throughout our theoretical validation of the TEUR, spin splitting due to finite values of spin-orbit interaction parameters, was nicely noticed.

[1] Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. 122:5, 1649 (1961).

[2] G. E. Giribet. Rev. Mex. Fís. E 51:1, 23 (2006).

[3] M. Ochoa "Estudio de la dinámica de los paquetes de ondas espín polarizados en presencia de acoplamiento espín-órbita", Tesis de Licenciatura, UNAM-Ensenada, Baja California, México (2006).

[4] D. Bohm, "Quantum theory", Dover Publications Inc. New York (1979).

[5] L. Diago-Cisneros, H. Rodríguez-Coppola, R. Pérez-Álvarez, and P. Pereyra, Phys. Rev. B 74, 045308 (2006).

[6] H. Rodríguez-Coppola, L. Diago-Cisneros, and R. Pérez-Álvarez, J. App. Phys. 102, 094315 (2007).

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Estructura electrónica en pozos cuánticos de silicio poroso

A. David Ariza-Flores ♦, L. M. Gaggero-Sager ♦, V. Agarwal †.

♦ Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos 62209,
Cuernavaca, Morelos, México.

† Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad
Autónoma
del Estado de Morelos 62209, Cuernavaca, México.

RESUMEN

Estamos presentando estudios teóricos sobre estructura electrónica en pozos cuánticos de Silicio Poroso (PS). Resolvemos la ecuación de Schrödinger 1-D y usamos la aproximación de masa efectiva para obtener los niveles energéticos de manera simple. Nuestros resultados muestran a primera aproximación que la realización de un láser con PS requiere un pozo cuántico muy estrecho lo cual sería muy difícil de lograr en el laboratorio.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Diagrama de bandas fonónico de un sistema de multicapas modulado según un perfil Gaussiano

X. I. Saldaña¹, D. A. Contreras-Solorio²

¹Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, Pue., México

²Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina con Paseo la Bufa S/N, 98060 Zacatecas Zac., México

RESUMEN

Usando el método de la matriz de transferencia se calcula el diagrama de bandas de ondas elásticas longitudinales en un sistema de multicapas alternadas de agua y vidrio en el que la impedancia acústica de las capas se modula de acuerdo a un perfil Gaussiano. Se supone al sistema inmerso en agua

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Propiedades ópticas de un cristal fotónico unidimensional de Fibonacci con inclusiones dieléctricas de índice de refracción n_a en un medio infinito de índice de refracción $n_b < n_a$

X. I. Saldaña¹, F. Pérez-Rodríguez¹

¹Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, Pue., México

RESUMEN

Se calcula el diagrama de bandas, la relación de dispersión y la reflectancia de un sistema formado por capas dieléctricas delgadas de ancho $d < \underline{\lambda}$ de índice de refracción n_a cuyos centros están colocados en los sitios $x_n = \{ \lfloor n/t \rfloor t + (n - \lfloor n/t \rfloor) \} * S$ que forman una secuencia de Fibonacci. Aquí t es la razón dorada y $\lfloor x \rfloor$ significa el mayor número entero $\leq x$

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Respuesta óptica de un medio laminado de Fibonacci con películas altamente anisotrópicas como materiales de velocidad de fase negativa

X. I. Saldaña¹ y G. H. Coccoletzi¹

¹Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, 72570 Puebla, Pue., México

Analizando la respuesta óptica de un medio laminado cuasiperiódico no magnético se encuentran las condiciones en las que se puede obtener una velocidad de fase negativa de la radiación electromagnética que se propaga en una estructura de Fibonacci construida con bloques de bicapas A y B en donde una de las capas es isotrópica y la anisotrópica. La permitividad dieléctrica del material anisotrópico está representado por un tensor diagonal de elementos $e_x = e_{\perp} < 0$, $e_y = e_z = e_{\parallel} > 0$ [1]

[1] P. H. Hernández, G. Martínez, G. H. Coccoletzi, H. Azucena-Coyotecatl y J. Díaz-Hernández, *J. Appl. Phys.* **101**, p. 093103, (2007)

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Propagación de ondas acústicas en fluidos viscosos rotatorios y compresibles y problemas de difracción.

José Marín Antuña, Javier Pardo Vega.

Departamento de Física Teórica, Universidad de La Habana, Cuba.

Email: marin@fisica.uh.cu, groibas@infomed.sld.cu

RESUMEN

Se deduce a partir de la ecuación de Navier-Stokes y la ecuación de continuidad para fluidos compresibles, una ecuación diferencial para la presión dinámica que describe las oscilaciones pequeñas en un fluido viscoso y rotatorio. Se analizan las relaciones de dispersión para tales ondas y se obtienen propiedades interesantes sobre la propagación de ondas en el fluido. El análisis de los casos límites cuando la viscosidad o la velocidad de rotación tienden a cero permite obtener las relaciones de dispersión para un fluido ideal rotatorio y para un fluido viscoso no rotatorio como casos particulares de la relación de dispersión general. Se aplica la ecuación diferencial obtenida al estudio del problema de la difracción de ondas en diferentes configuraciones en un fluido ideal rotatorio.

**II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
DE LA UAEM**

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

**Improved continuum treatment for confined optical phonons in
Ge/Si/Ge quantum-wells**

José Manuel Nieto Jalil.

Tecnológico de Monterrey, Campus Sonora Norte
Carretera Hermosillo Nogales Km. 9, Hermosillo, Sonora CP 83000, México

RESUMEN

A continuum phenomenological model for long-wavelength nonpolar optical modes in semiconductor heterostructures is proposed. Confined optical phonons are discussed for a semiconductor quantum-well based on Si/Ge by using a theory developed some years ago. In the present treatment this theory is adapted to a non polar material and generalized to the case when the phonon dispersion law involves both linear and quadratic terms in the wave vector. We apply a continuous medium model leading to a system of coupled differential equations describing oscillations of mixed nature. The solutions of the fundamental equations are found by taking advantage of analogous works on the subject. We are thus led to a description of long wavelength optical phonons showing a close agreement with experimental data and with calculations along atomistic models.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Solución de distintos problemas de contorno de la Ecuación de Masa Efectiva con masa variable

L. Silba y R. Pérez-Álvarez

Universidad Autónoma del Estado de Morelos

RESUMEN

Los estados electrónicos en sistemas a capas se describen con un grado de exactitud razonable en el marco de la llamada Teoría de Masa Efectiva. La ecuación de movimiento tiene entonces una forma muy parecida a la de Schrödinger pero con masa dependiente de la posición y el potencial viene dado por el perfil del borde de la banda en cuestión a lo largo de la estructura. Estas diferencias con la ecuación de Schrödinger estándar hacen necesario y conveniente que se estudien los problemas de contorno arquetípicos precisando los cambios que parecen producto de la dependencia de la masa con la posición. Nos referimos, por ejemplo, al problema de la determinación de los estados acotados (cuantización de energía), de la solución del problema de dispersión (coeficientes de reflexión y transmisión), de la relación de dispersión del problema periódico, así como de problemas algo menos típicos como el del escape de la estructura. Particular interés pudieran tener aquellas estructuras en que los medios involucrados tienen un perfil de banda plano (banda de energía constante) por lo que todos los efectos cuánticos aparecerían por la dependencia de la masa con la posición. Esta problemática ha cobrado importancia en tiempos recientes por el reporte teórico y experimental de los llamados estados virtuales acotados, los cuales pertenecen a la parte continua del espectro pero gozan de algunas características de los estados acotados, aportando estructuras muy definidas en el espectro de luminiscencia y de otras propiedades ópticas y de transporte.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Fractalidad de espectros en heteroestructuras que modelan las secuencias de bases nitrogenadas en el DNA

R. Pérez-Álvarez, M.E. Mora-Ramos y L.M. Gaggero-sager

Universidad Autónoma del Estado de Morelos

RESUMEN

En los últimos años se han reportado supuestas similitudes entre las secuencias de bases nitrogenadas del DNA y las llamadas estructuras cuasirregulares, particularmente la de Rudin-Shapiro. Para dar algo de luz en este asunto, hemos estudiado el espectro de los modos electromagnéticos TE en varias heteroestructuras hechas de silicio poroso y que siguen diferentes secuencias de bases de DNA. La conclusión principal es que, al menos en los casos estudiados, no se encuentra un claro comportamiento fractal en estos espectros. No obstante, experimentos similares en la secuencia de Rudin-Shapiro sí lo encuentran. Estos resultados indican que se debe ser más cauteloso cuando se comparan estas dos secuencias.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Scattering of spin-dependent hole wave-packet on quasi-one-dimensional semiconductor systems

R. Cuan, G. Bonfanti-Escalera[†], L. Diago-Cisneros^{*}

Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba.

[†]Departamento de Física y Matemática, Universidad Iberoamericana . DF,
México.

^{*}Departamento de Física Aplicada, Facultad de Física, Universidad de La
Habana. Cuba.

RESUMEN

We present a partial theoretical study of the quantum transport of uncoupled holes, through a *cuasi*-onedimensional system in the presence of Rashba spin-orbit interaction modeling for a Datta and Das's spin field effect transistor. The aim of the present report is to analyze the evolution of spin-polarized Gaussian hole wave-packet, while it scatter from a stationary potential barrier with spin-orbit coupling. To describe the dynamics of holes we take the (4x4) $\kappa \cdot \mathbf{p}$ Kohn-Luttinger model¹, in the case of null transversal quasimomentum, and we suitably added the coupling term, taking in to account the similarity between electrons and holes under the preceding approach. Following these ideas we obtain a system that couples the holes with the same effective mass due to the spin-orbit interaction term. The dispersion law shows how the spin degeneracy breaks. For the solution we propose the finite difference method² and the stationary phase approach³. We describe briefly the scheme that we use for the numeric simulation. Furthermore, we show the timeline of the wave packet evolution and his scattering for both spin polarizations.

1. L. Diago, H. Rodríguez, R. Pérez, Rev. Mex. Fis. 46, 337 (2000).
2. M. Ochoa, "Estudio de la dinámica de paquetes de onda espín-polarizados en presencia de acoplamiento espín-órbita", Cap. 3 y 4, tesis de Licenciatura, UNAM-Ensenada, (2007).
3. G. Bonfanti "Inecuación de Heisenberg entre tiempo y energía: Interpretaciones, Falacias y Aplicaciones", Cap. 3, tesis de Ingeniería Física, Universidad Iberoamericana-Facultad de Física UH (2008).

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Generalized eigen-value problem triangularization conditions in the multiband effective mass theory

A. Mendoza-Álvarez[†], G. Fernández-Anaya[†] and L. Diago-Cisneros^{*}

[†]Departamento de Física y Matemáticas, Univ. Iberoamericana, D.F. México.

^{*}Departamento de Física Aplicada, Fac. de Física. Univ. de La Habana. Cuba

RESUMEN

Meaningful, and well-founded physical quantities are convincingly determined by eigenvalue problem solutions [1, 2, 3, 4] emerging from a second order N -coupled system of differential equations, known as Sturm-Liouville matrix boundary problem [5, 6]. Within the envelope function approximation framework (EFA), non-linear eigenvalue equations had been usually disregarded by many authors, despite its eminent importance. In this report we had focused to prove the existence of sufficient and necessary conditions to solve directly the generalized *eigenvalue* problem (GEP) as a simultaneous triangularization decomposition. Previous classical review on a related matter is not quite general, because GEP's matrices can be demonstrated to depart from mutable matrices in the Frobenius theorem's sense [7]. More recent and remarkable examinations [8, 9, 10, 11] provide just sufficient conditions that rely on pure numerical methods. Besides, they do not perform simultaneous diagonalization [8] or do not straightforwardly apply on concrete physical systems [9, 10, 11]. As a consequence, further studies on generic necessary and sufficient conditions for the simultaneous triangularization by unitary congruence of a matrix pair, are then required. Circumstantial solutions to a $(2N \times 2N)$ generalized eigenvalue problem for uncoupled systems -within the EFA framework-, were already reported [12]. We present here suitable criteria on this topic applicable to multiband GEP equations, that hopefully could be extended to any envelope function approximation model (when $N \geq 2$), with minor changes if any. We found useful to exercise the necessary and sufficient conditions deduced, in the framework of the $k \cdot p$ (4×4) Kohn-Luttinger two-band model due to its widely accepted accuracy for describing dynamics of elementary excitations in the Valence Band. We think that this way, our contribution has a balanced mathematical description of the topic and its applications to a concrete physical system.

[1] P. Lancaster, *Lambda-Matrices and Vibrating Systems*" (Editorial Pergamon Press, Oxford, UK, 1966).

[2] I. Gohberg, P. Lancaster y L. Rodman, *Matrix Polynomials*" (Editorial Academic Press, New York, (1982).

[3] F. Tisseur and K. Meerbergen, *SIAM Review* 43, 235 (2001).

[4] Leonard Hoening, Ren Cang-Li, Quiang Ye, *Linear Algebra Appl.* 415, 52 (2006).

[5] A. M. Malik, M. J. Godfrey and P. Dawson, *Phys. Rev. B* 59, 2861 (1999).

[6] R. Pérez-Alvarez, C. Trallero-Herrero and F. García-Moliner, *European Journal of Physics* 22, 275 (2001).

[7] Neal H. McCoy, "On the characteristic roots of matrix polynomials", *Bull. Amer. Math. Soc.*, 42:592, 600 (1936).

[8] C. B. Moler and G. W. Stewart, *SIAM J. Numer. Anal.* 10, 241 (1973).

[9] M. Haardt, K. Häuper, J. Moore and J. Nossek, *Proceedings of EUSIPCO-96*", (Trieste, Italy, 1996) vol.1, pp.531-534.

[10] M. Haardt and J. A. Nossek, *IEEE* 46, 161 (1998).

[11] L. de Lathauwer, B. de Moore, and J. Vandewalle, *SIAM J. Matrix Anal. Appl.* 26, 295 (2004).

[12] L. Diago-Cisneros, G. Fernández-Anaya and G. Bonfanti-Escalera, *Physica Scripta* 78, 035004, (2008).

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Propiedades ópticas de las heteroestructuras híbridas de Bragg-Fibonacci-Bragg en Silicio Poroso

José Escorcía-García¹, Miguel E. Mora-Ramos²

¹*Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, 62209, Cuernavaca, México.*

²*Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, 62209, Cuernavaca, México.*

RESUMEN

En el presente trabajo reportamos teóricamente las propiedades ópticas de las heteroestructuras híbridas de Bragg-Fibonacci-Bragg tales como reflectancia, omnidireccionalidad, y aparición de brechas fotónicas. Además, estudiamos la distribución de la intensidad de campo eléctrico E a lo largo de las estructuras para las frecuencias estacionarias propias de la estructura híbrida. Las estructuras híbridas consisten de una distribución geométrica en forma de "sandwich" conformado por dos estructuras de Bragg (BM) y una Fibonacci (FN). El espesor e índice de refracción de las capas que componen la estructura satisfacen la condición $nd = \lambda/4$, donde el índice de refracción varía de 1.2 a 2.5. La simulación teórica de la reflectancia y de la distribución del campo eléctrico fue realizada usando el formalismo de la matriz de transferencia, partiendo de la ecuación de Maxwell en una dimensión para el caso de modos TE propagándose a través de la estructura. Los resultados muestran que es posible diseñar y fabricar estructuras híbridas de BM-FN-BM cuya respuesta óptica muestra microcavidades con modos de localización muy fuertes utilizando un número relativamente pequeño de capas. Además, el rango de omnidireccionalidad resultante de la estructura híbrida es mayor que el de sus estructuras individuales, hasta cierto ángulo crítico, a partir del cual el rango de omnidireccionalidad se fragmenta en partes más pequeñas. Finalmente, se demuestra que algunas de las frecuencias estacionarias muestran localización espacial del campo eléctrico. El confinamiento de la intensidad de E ocurre ya sea una de las estructuras de Bragg, o en la estructura de Fibonacci, dependiendo de la longitud de onda incidente. Este hecho puede ser interesante para aplicaciones de amplificación si en un sistema híbrido pudiera un haz de luz ser confinado en una microcavidad junto con sus propios modos estacionarios del sistema, para una determinada longitud de onda incidente.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Diseño de heteroestructuras cuánticas que generan estados electrónicos cuasiligados.

E. A. Carrillo-Delgado, S. JeleV-Vlaev, I. Rodríguez-Vargas

Unidad Académica de Física. Universidad Autónoma de Zacatecas

RESUMEN

Presentamos cálculos numéricos que demuestran la existencia de los estados electrónicos confinados en la parte continua del espectro en pozos y barreras rectangulares cuánticas simples. Estudiamos las condiciones necesarias para la creación de estos estados. Encontramos fuerte localización energética y espacial de los estados cuasiligados para altas energías en la banda de conducción. Los resultados pueden ser usados en el diseño de dispositivos optoelectrónicos que operan en base a los estados confinados en el continuo.

II TALLER DE MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR DE LA UAEM

Cuernavaca, Morelos, 12-14 de enero de 2009

Estados electrónicos en potenciales tipo Cantor

D.S. Díaz-Guerrero, F. Montoya, L. M. Gaggero-Sagger

Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma del Estado de Morelos.
Avenida Universidad 1001. CP 62209
Cuernavaca. Morelos. México

RESUMEN

La transmitancia en un potencial cuántico multibarrera resulta de gran interés debido a las posibles aplicaciones en la física de semiconductores. En este trabajo se consideran sistemas de este tipo que resultan de combinar las conocidas superredes (superlattices) con potenciales tipo Cantor. El potencial tipo Cantor se construyó modificando la altura y el ancho de las barreras según la regla del conjunto de Cantor. A este potencial se le adjuntaron dos superredes en los extremos (una en el extremo izquierdo y otra en el extremo derecho). Los resultados, para la transmitancia, varían en función del ancho de las barreras de las superredes. Sin embargo, se obtiene una estructura de bandas similar a la de una superred, pero con notables cambios en los máximos y mínimos del espectro, lo cual sugiere fractalidad del espectro.