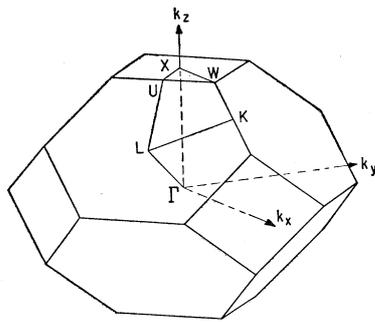




# Sexto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular



2013



## Índice

Índice .....	3
Instituciones organizadoras y patrocinadoras.....	5
Comité Organizador.....	5
Algunos datos de carácter organizativo .....	5
Programa .....	7
LUNES 7 de enero. Presiden: R. Baquero Parra y R. Pérez Álvarez .....	7
MARTES 8 de enero. Presiden: O. Vigil Galán y L.M. Hernández García .....	8
MIÉRCOLES 9 de enero. Presiden: A. Ramírez Solís y M.E. Mora Ramos .....	9
JUEVES 10 de enero, Universidad Iberoamericana, Auditorio Fernando Bustos Barrena S.J., Edificio S, 2do nivel. Presiden: A. Mendoza Álvarez y L.M. Gaggero Sager .....	10
TÍTULOS Y RESÚMENES DE LAS CONFERENCIAS .....	11
TÍTULOS Y RESÚMENES DE LOS CARTELES .....	53



## Instituciones organizadoras y patrocinadoras

1. Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM)
2. Universidad Iberoamericana
3. Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM)
4. *European Physical Society*

## Comité Organizador

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

## Algunos datos de carácter organizativo

1. El 6to Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular tendrá lugar del 7 al 10 de enero de 2013. Del lunes 7 al miércoles 9 sesionaremos en el hotel Los Belenes de Cuernavaca, C. Coronel Ahumada No. 413, Colonia Los Volcanes, Cuernavaca. El jueves 10 trasladaremos nuestras sesiones al auditorio "Fernando Bustos Barrena", edificio S, 2do piso, Universidad Iberoamericana (Prolongación Paseo de la Reforma 880, Lomas de Santa Fe, Distrito Federal).
2. El Comité Organizador ha reservado prácticamente todo el hotel Los Belenes. Rogamos a los participantes nos avisen qué día van a llegar y qué día se retiran. El uso de este hotel incluye desayuno, comida y cena.
3. A los participantes que se hospeden fuera de Los Belenes, el Comité Organizador los invita a la comida y a los cafés.
4. Los organizadores hacemos un esfuerzo por crear en el Taller un clima relajado de intercambio de ideas y experiencias por lo que la parte protocolar y de exigencias formales está reducida a lo que el sentido común indica como imprescindible.
5. Los participantes nos han proporcionado el título, autores y resumen de sus trabajos. Estos pueden estar en inglés o español y no hemos puesto exigencias de formato y extensión; los autores pueden guiarse por su sentido común y normas usuales en estos casos. Las exposiciones pueden también ser en cualquiera de estas lenguas. De acuerdo a la experiencia de los Talleres anteriores, muchos expositores optan por hablar en español pero sus presentaciones –de *power point* típicamente– están en inglés.
6. Sugerimos que los autores de carteles los pongan apenas lleguen al Taller; el mismo lunes, de preferencia. De este modo, aunque hemos previsto una sesión de carteles, los participantes tendrán más tiempo para verlos.
7. En esta edición del Taller tendremos todo un día (martes 8) dedicado a las Energías Renovables. La organización de esta parte del Taller corre a cargo del Dr. Osvaldo Vigil Galán ([osvaldo@esfm.ipn.mx](mailto:osvaldo@esfm.ipn.mx)).

8. No publicamos los trabajos en extenso. Pero, por iniciativa de algunos participantes, los organizadores del Taller, hemos coordinado la publicación de un libro de monografías con el título "*Some current topics in Condensed Matter Physics (2013)*". Estas monografías no tienen que corresponderse necesariamente con los trabajos presentados ni autores participantes en el Taller. Para 2013 pretendemos hacer lo mismo, pero debe entenderse que este es un esfuerzo independiente del Taller. Los autores interesados en que aparezca su trabajo en extenso en el Libro que publicaremos posterior al Taller, deben enviarnos el material cuanto antes. Fecha tope: 1 de mayo 2013.
9. Éstas y otras informaciones pueden verse en nuestra página web: <http://web.fc.uaem.mx:8080/~tallerfmcm/>
10. **El programa está muy apretado. Exhortamos a todos los participantes a contribuir al cumplimiento del horario.**

## Programa

LUNES 7 de enero. Presiden: R. Baquero Parra y R. Pérez Álvarez

Horario	Título	Autores
10:00-10:45	Resonant tunneling effects through graphene-based structures	I. Rodríguez-Vargas
10:45-11:30	Grafeno y superconductividad	R. Baquero
11:30-12:00	Espectro energético de las ondas de espin en un medio con periodicidad milimétrica	Guillermo Monsivais Galindo y César Leonardo Ordóñez Romero
12:00-12:30	<b>RECESO</b>	
12:30-13:00	The hydrostatic pressure effects on intersubband optical properties of $\delta$ -MIGFET in GaAs	Outmane Oubram
13:00-13:30	Vórtices deformados en condensados de polaritones.	Miller Toledo Solano.
13:30-14:00	Solución de ecuaciones diferenciales parciales utilizando el método de colocación con funciones de base radial (RFM): Aplicación al flujo de polímeros	Walter Antonio Ospina Muñoz, Eugenio Giraldo Tobón y Guillermo León Miranda Pedraza
14:00-14:30	Scaling in the correlation energies of two dimensional quantum dots	Alexander Odriazola, Ilja Makkonen, Mikko M. Ervasti, Alain Delgado, Augusto Gonzalez and Ari Harju
14:30-16:00	<b>COMIDA</b>	
16:00-16:30	Respuesta magnética de superconductores tipo II en presencia de campos magnéticos rotantes y cruzados	R. Cortés-Maldonado, F. Pérez-Rodríguez
16:30-17:00	One Phonon Resonant Raman Scattering in Semiconductor Quantum Wires: Magnetic Field Effect	Re. Betancourt-Riera, Ri. Betancourt-Riera, J.M. Nieto Jalil and R. Riera
17:00-17:30		
17:30-18:00		

**MARTES 8 de enero. Presiden: O. Vigil Galán y L.M. Hernández García**

Horario	Título	Autores
10:00-10:30	Toward a 50% efficiency in solar cells	L. Hernández, D. A. Contreras-Solorio, C. I. Cabrera, J.C. Rimada, M. Courel
10:30-11:00	Study of semiconductor nitrides thin films for photovoltaic (PV) applications	L.A. Hernández-Hernández, F. de Moure Flores, G. Contreras-Puente, O. de Melo, M. López-López, J. Aguilar-Hernández, E. Hernández-Cruz, G. Santana-Rodríguez, R. Mendoza-Pérez, A. Escamilla-Esquivel, L. Zamora
11:00-11:30	Sistema automatizado para el crecimiento de películas delgadas depositadas por rocío químico neumático	Osvaldo Delgado-Vasallo, Daniel Jiménez-Olarte, Osvaldo Vigil Galán
11:30-12:00	Influencia de la concentración de oxígeno en el tratamiento con $CdCl_2$ sobre las propiedades fotovoltaicas de celdas solares de CdTe/CdS	E. Regalado-Pérez, X. Mathew
12:00-12:30	<b>RECESO</b>	
12:30-13:00	Implicaciones de la Incorporación de Sodio en Puntos Cuánticos de Sulfuro de Bismuto, Usados como Sensibilizadores en Celdas Solares	Inti Zumeta Dubé, David Díaz
13:00-13:30	Escritura laser de películas delgadas de CdTe para interconexión en serie de celdas solares de CdS/CdTe.	D. Jiménez-Olarte, O. Vigil-Galán, G. Contreras-Puente, M. Villagran-Muniz, J.Santoyo-Morales, C. Sánchez-Aké, F. De Moure-Flores
13:30-14:00	Dependencia de la formación de fases secundarias con la composición química en películas delgadas de $Cu_2ZnSnS_4$ depositadas por rocío químico neumático	Maykel Courel Piedrahita, Moisés Espíndola-Rodríguez y Osvaldo Vigil Galán
14:00-14:30	Material issues in the development of solar cells using evaporated antimony sulfide thin film absorber	J. Escorcía-García, D. Becerra, M.T.S. Nair, P.K. Nair
14:30-16:00	<b>COMIDA</b>	
16:00-16:30	La trayectoria hacia celdas solares de alta eficiencia basadas en compuestos $Cu_2ZnSnS_4$	Osvaldo Vigil Galán
16:30-17:00	Estudio de películas delgadas de ZnO y ZnO:Al depositadas por erosión catódica de RF para su aplicación en celdas solares de película delgada de CIGS/CdS	F.A. Zubieta López, M. Tufiño Velázquez, A. Morales Acevedo, G. Casados Cruz, G. Contreras Puente y R. Mendoza-Pérez
17:00-17:30	Procesamiento de dispositivos fotovoltaicos a base de películas delgadas de $CuInGaSe_2$ obtenidas por la técnica de co-evaporación térmica multifuentes	J. Sastré-Hernández, M. E. Calixto, G. Contreras-Puente, M. Tufiño-Velázquez, A. Morales-Acevedo, G. Casados-Cruz y M. L. Albor-Aguilera
17:30-18:00	Propiedades físicas de películas delgadas de CdS depositadas por DBQ-Fotoasistido	M.L. Albor Aguilera, M.A. González Trujillo, J.M. Flores Márquez, R. Acosta Nieto, Y. Matsumoto Kuwahara, O. Vigil Galán
18:00-18:30	Propiedades físicas de películas delgadas de ZnTe para su aplicación como contacto posterior en celdas solares de CdTe	M.A. González Trujillo, M.L. Albor Aguilera, D.A. Rodríguez Morán, Y. Matsumoto Kuwahara

**MIÉRCOLES 9 de enero. Presiden: A. Ramírez Solís y M.E. Mora Ramos**

<b>Horario</b>	<b>Título</b>	<b>Autores</b>
10:00-10:30	Sobre la estructura y estabilidad del complejo (S <sub>2</sub> ) <sub>4</sub> con spin cero. Estudios benchmark MP2, CASPT2 y CCSD(T).	A. Ramírez-Solís, A. Ochoa Calle y R. Hernández-Lamoneda
10:30-11:00	La presencia de especies ocluidas, puede revertir la estabilidad de dos zeolitas durante la cristalización? Los casos de Theta-1 e ITQ-12 puramente silícicas	C. Zicovich Wilson
11:00-11:30	¿Qué hace a un dominio monomérico de inmunoglobulina formar fibras amiloides?	Nina Pastor, Jessica Araujo, Diana Valenzo, César Millán, y Alejandro Fernández
11:30-12:00	Investigación de gases electronegativos en descarga de cátodo hueco	J Rodríguez, FB Yousif, AB Mondragon, B Fuentes, F. Vazquez and R. Díaz
12:00-12:30	<b>RECESO</b>	
12:30-13:30	Amine adsorption in copper succinate	J. Balmaseda, B. Torruco, P. Vera-Cruz, L. F. del Castillo and M. Bastarrechea
13:30-14:30	Condensed exciton-polaritons in a 2D trap: elementary excitations and shaping by Gaussian pump beam	C. Trallero-Giner
14:30-16:00	<b>COMIDA</b>	
16:00-16:30	La Sociedad Cubana de Física hoy	Augusto González García, Presidente de la SCF
16:30-17:00	Proyección del CLAF para los próximos años	Carlos Trallero Giner, Director del CLAF
17:00-18:00	Reunión para interesados en (a) Proyectos conjuntos, (b) Formación conjunta de recursos humanos, (c) Comercialización de resultados de la investigación en Cuba y México, (d) Otros temas de cooperación	Presiden: Carlos Trallero Giner, Director del CLAF y Augusto González García, Presidente de la SCF
18:00-19:00	<b>SESIÓN DE CARTELES</b>	

**JUEVES 10 de enero, Universidad Iberoamericana, Auditorio Fernando Bustos Barrena S.J., Edificio S, 2do nivel. Presiden: A. Mendoza Álvarez y L.M. Gaggero Sager**

Horario	Título	Autores
10:00-10:30	Incremento de la Biodegradabilidad de aguas residuales contaminadas con azul índigo por medio de Foto-Fenton asistido con iones Ferrioxalato	Rubén Vásquez Medrano, Michel Vedrenne, Dorian Prato, Bernardo Frontana y Margarita Hernández
10:30-11:00	Inestabilidad de Jeans y formación de estructuras en un gas diluido bajo la consideración de dos posibles ecuaciones constitutivas para el flujo de calor	Humberto Mondragón Suárez
11:00-11:30	Hidrogeles biopoliméricos aplicados en agricultura	D. Lemus, E Sánchez-Aguilera y R.F. Estrada
11:30-12:00	<b>Receso</b>	
12:00-12:30	Transiciones de Fase en una Malla Transitoria	Eduardo Rincón Aguilar
12:30-13:00	Extensión de la ley de Tolman a sistemas relativistas fuera de equilibrio termodinámico	Brun-Battistini
13:00-13:30	Aprovechamiento integral de la corriente eléctrica en celdas electroquímicas	Jorge G. Ibáñez-Cornejo
13:30-14:00	<b>CLAUSURA</b>	
14:00	<b>VINO Y CANAPÉS CORTESÍA DE LA UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA</b>	

## TÍTULOS Y RESÚMENES DE LAS CONFERENCIAS



**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**LUNES 7**

CONFERENCIA 01

**Resonant tunneling effects through graphene-based structures**

I. Rodriguez Vargas

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

We study the resonant tunneling effects through Graphene-Based Structures (GBSs). We have considered two types of GBSs in order to take into account or rule out Klein tunneling effects: 1) the well-known and documented electrostatic-barrier structures (EBSs) created by means of electrostatic probes that act perpendicularly to the graphene sheet; and 2) substrate-barrier structures (SBSs) built sitting the graphene layer on alternating substrates, such as SiO<sub>2</sub> and SiC, which are capable of non-open and open an energy bandgap on graphene. The transfer matrix approach is used to obtain the transmittance, linear-regime conductance and electronic structure for different set of parameters such as electron energy, electron incident angle, barrier and well widths. Particular attention is paid to the asymmetric characteristics of the GBSs, as well as to the main differences between Klein and non-Klein tunneling structures. We find that: 1) the transmission properties can be modulated readily changing the energy and angle of the incident electrons, the widths of the well and barrier regions; 2) the linear-regime conductance is easily enhancing, diminishing and shifted changing from symmetric to asymmetric GBSs configuration overall in the case of non-Klein tunneling structures ; 3) the conductance shows an oscillatory behavior as function of the well width, with peaks that are directly related to the opening and opening-closure of bound-state subbands for EBSs and SBSs, respectively.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013  
LUNES 7**

CONFERENCIA 02

**Grafeno y superconductividad**

R. Baquero

Departamento de Física- cinvestav

Uno de los acontecimientos más impactantes del año 2012, es el muy reciente reporte acerca de superconductividad a temperatura ambiente medida en grafeno tratado con agua. La existencia de superconductividad a temperatura ambiente ha sido reportada varias veces desde los años setenta del siglo pasado pero no ha llamado suficientemente la atención de los investigadores. Este nuevo reporte ha tenido mucho mayor impacto y el resultado ha sido reproducido de manera independiente. En esta charla, describiré la física tan peculiar del grafeno y abordaré, en particular, el tema de la superconductividad a temperatura ambiente.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**LUNES 7**

CONFERENCIA 03

**Espectro energético de las ondas de espín en un medio con periodicidad milimétrica**

Guillermo Monsivais Galindo y César Leonardo Ordóñez Romero

Instituto de Física, UNAM

Los cristales magnónicos son materiales magnéticos con una estructura periódica. Estos materiales son artificiales y su periodicidad se produce variando periódicamente alguno de sus parámetros magnéticos. Sus propiedades son de gran interés, tanto para la física fundamental como para las aplicaciones tecnológicas. Actualmente están colocados en una posición central en la investigación de física fundamental y el campo de ingeniería de señales a frecuencias de microondas. De manera semejante a los sistemas acústicos y ópticos, las características de dispersión de las ondas de espín en los cristales magnónicos son fuertemente modificadas respecto a las de los medios uniformes. El resultado es la formación de brechas prohibidas en el espectro energético donde las ondas de espín no pueden propagarse. En este trabajo se presenta un modelo basado en el hamiltoniano de Heisenberg en el que se ha introducido una estructura periódica. Se resuelve analíticamente la ecuación resultante y se obtiene una expresión cerrada que determina la estructura de bandas. Se presentan resultados experimentales que confirman la existencia de una estructura de bandas. También se analiza teóricamente el efecto de añadir una variación lineal a la estructura periódica y la posibilidad de crear resonancias de Wannier-Stark.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013  
LUNES 7**

CONFERENCIA 04

**The hydrostatic pressure effects on intersubband optical properties of  $\delta$ -MIGFET in GaAs**

Outmane Oubram

Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma de Morelos.

The effects of hydrostatic pressure on subband structure and optical transitions in GaAs delta- Multiple Independent Gate Field Effect Transistor ( $\delta$ -MIGFET) are theoretically studied. The electronic structure of  $\delta$ -MIGFET under the hydrostatic pressure is determined by solving the Schrodinger equation and a simple algebraic method. From calculations, it is found that the subband energies and intersubband optical absorption are quite sensitive to the applied hydrostatic pressure and voltage contact. Our results show that the pressure and voltage contact plays an important role in the optical absorption coefficients in a  $\delta$ -MIGFET.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**LUNES 7**

CONFERENCIA 05

**Vórtices deformados en condensados de polaritones.**

Miller Toledo Solano.

El condensado polaritónico posee un parámetro de orden de dos componentes lo que a su vez permite la existencia de vórtices semi-enteros o semi-vórtices. A pesar de la observación reciente de ambos vórtices, entero [1] y semi-vórtice [2], en el condensado polaritónico, la presencia de los semi-vórtices fue cuestionado recientemente [3] para el caso cuando en la relación de dispersión de los polaritones libres se incluye la división transversal eléctrica transversal magnética TE-TM ("splitting" TE-TM) presente en el sistema.

En esta charla presentaré los detalles sobre como las soluciones tipo semi-vórtices deben encontrarse en este caso. Presentaré además resultados sobre la deformación del campo de polarización de los semi-vórtices por efectos la división TE-TM.

[1] K. G. Lagoudakis, M. Wouters, M. Richard, A. Baas, I. Carusotto, R. André, L. S. Dang, B. Deveaud-Plédran, Nat. Phys. 4, 706, (2008).

[2] K. G. Lagoudakis, T. Ostatnicky, A. V. Kavokin, Y. G. Rubo, R. André, and B. Deveaud Plédran, Science 326, 974, (2009).

[3] H. Flayac, I. A. Shelykh, D. D. Solnyshkov, and G. Malpuech, Phys. Rev. B 81, 045318, (2010).

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**LUNES 7**

CONFERENCIA 06

**Solución de ecuaciones diferenciales parciales utilizando el método de colocación con funciones de base radial (RFM): Aplicación al flujo de polímeros**

Walter Antonio Ospina Muñoz, Eugenio Giraldo Tobón y Guillermo León Miranda Pedraza.

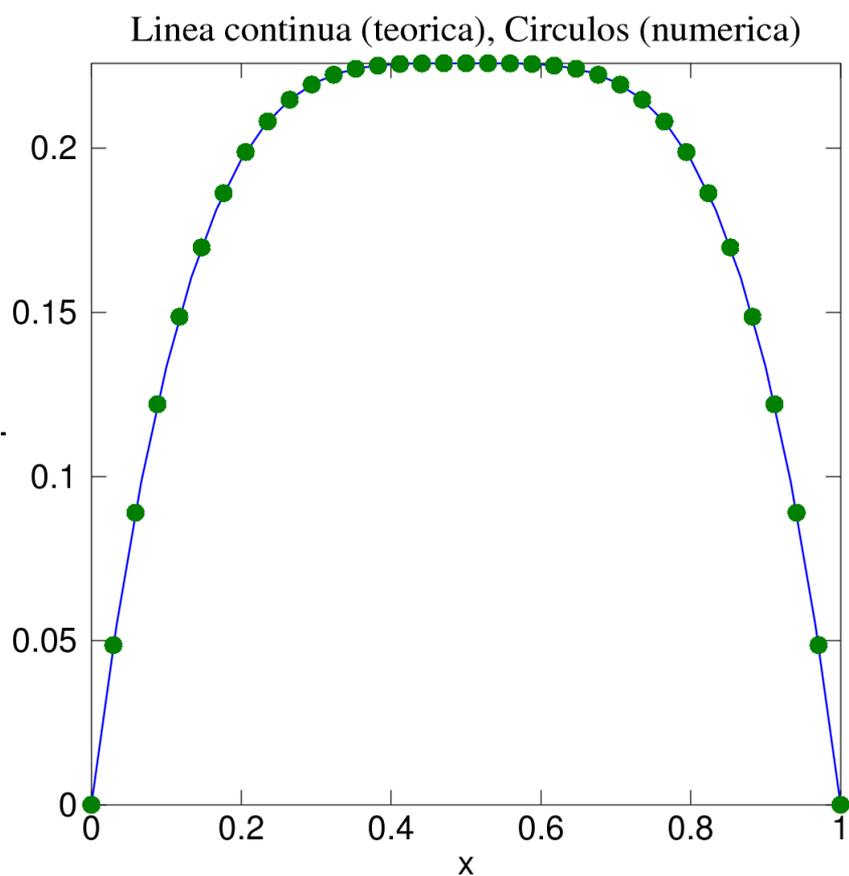
Física Teórica y Aplicada. Escuela de Ingeniería de Antioquia. Km. 2+200 Vía Aeropuerto J. M. Córdoba.  
Envigado. Colombia

En este trabajo se presenta un esquema de solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales usando el método de funciones de base radial (RBFN). Para ilustrarlo se resuelve una aplicación a la dinámica de los fluidos, en especial fluidos poliméricos, sabiendo que para modelar y simular este tipo de materiales se han utilizado, tradicionalmente, métodos basados en mallas tales como el método de diferencias finitas (FDM), el método de volúmenes finitos (FVM), el método de elementos finitos (FEM) y el método de elementos de frontera (BEM) los cuales presentan grandes dificultades cuando se deben resolver problemas sobre dominios que sufren altas deformaciones.

Por otra parte, los llamados métodos libres de malla han recibido una atención considerable en los últimos tiempos como alternativas a esos métodos tradicionales. Se destaca, en especial, el método de colocación con funciones de base radial (RFM). Nosotros abordamos el problema de estudiar flujos en polímeros usando los métodos libres de malla "Local Radial Basis Function Collocation Method" [1-3] y "Indirect Radial Basis Function Network" [4,5] en el desarrollo de una solución numérica de las ecuaciones acopladas de la energía, cantidad de movimiento y continuidad en 2D para fluidos pseudoplásticos no isotérmicos, presentándolo como una solución alternativa al método de RFM.

Además, como perspectiva futura, prevemos la aplicación directa y relativamente sencilla de esta clase de métodos al estudio de algunos temas característicos de la Física de Materia Condensada como pueden ser las propiedades electrónicas y ópticas de heteroestructuras semiconductoras con geometrías no convencionales en una, dos y tres dimensiones, mediante la solución de las ecuaciones acopladas de Schrödinger y Poisson. También, se pueden utilizar en la solución de las ecuaciones del campo electromagnético en cristales fotónicos y en la investigación de distintas propiedades de los llamados metamateriales.

En la gráfica se presenta el resultado obtenido al resolver la ecuación de la energía para un fluido viscoso en movimiento entre dos placas rectangulares teniendo en cuenta la conducción de calor desde una pared al fluido. En ella se puede observar la concordancia entre los datos obtenidos numéricamente y los obtenidos con la solución exacta de la ecuación diferencial.



Bibliografía:

- [1] E. Divo and A. Kassab. Iterative domain decomposition meshless method modeling of incompressible viscous flows and conjugate heat transfer. *Engineering Analysis With Boundary Elements*, 30 p. 465 – 478, 2006.
- [2] E. Divo and A. J. Kassab. A meshless method for conjugate heat transfer problems. *Engineering Analysis With Boundary Elements*, 29 p. 136 – 149, 2005.
- [3] E. Divo and A. J. Kassab. An efficient localized radial basis function meshless method for fluid flow and conjugate heat transfer. *Journal of Heat Transfer-Transactions of The ASME*, 129 p. 124 – 136, 2007.
- [4] N. Mai-Duy and T. Tran-Cong. Approximation of function and its derivatives using radial basis function networks. *Applied Mathematical Modelling*, 27 p. 197– 220, 2003.
- [5] N. Mai-Duy and T. Tran-Cong. Indirect RBFN method with thin plate splines for numerical solution of differential equations. *Cmes-Computer Modeling In Engineering & Sciences*, 4(1) p. 85 – 102, 2003.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**LUNES 7**

CONFERENCIA 07

**Scaling in the correlation energies of two dimensional quantum dots**

Alexander Odriazola<sup>{1,3}</sup>, Ilja Makkonen<sup>{1,2}</sup>, Mikko M. Ervasti<sup>{1,2}</sup>, Alain Delgado<sup>{4,5}</sup>, Augusto Gonzalez<sup>{3}</sup> and Ari Harju<sup>{1,2}</sup>

<sup>{1}</sup> COMP Centre of Excellence, Department of Applied Physics, Aalto University School of Science, PO Box 14100, FI-00076 AALTO, Espoo, Finland

<sup>{2}</sup> Helsinki Institute of Physics, Aalto University, PO Box 14100, FI-00076 AALTO, Espoo, Finland

<sup>{3}</sup> Institute of Cybernetics Mathematics and Physics (ICIMAF), Calle E 309, CP 10400, Havana, Cuba

<sup>{4}</sup> CNR-NANO S3, Institute for Nanoscience, Via Campi 213/A 41125, Modena, Italy

<sup>{5}</sup> Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear (CEADEN), Calle 30 502, CP 11300, Havana, Cuba

Extensive numerical calculations of the ground-state energy of charged 2D-quantum dots were performed by means of different computational methods. Hartree-Fock, configuration interaction, variational Monte Carlo and density functional theory approaches were considered. On the basis of the numerical evidence, it was found that the correlation energies scale as  $E_{\text{corr}}/(\hbar \omega) \sim N^{3/4} f_{\text{corr}}(N^{1/4} \beta)$ , where  $N$  is the number of electrons, the coupling constant  $\beta$  is the ratio between Coulomb and oscillator ( $\hbar \omega$ ) characteristic energies, and  $f_{\text{corr}}$  is a universal function. An analytic expression for  $f_{\text{corr}}$  is provided based on a two-parameter fit. In addition, analytic expressions for the correlation energy per particle and for the fraction of the total energy associated to the correlation energy are also provided.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**LUNES 7**

CONFERENCIA 08

**Respuesta magnética de superconductores tipo II en presencia de campos magnéticos rotantes y cruzados**

R. Cortés-Maldonado<sup>1</sup>, F. Pérez-Rodríguez<sup>1</sup>

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

El comportamiento de bloques superconductores irreversibles y semirreversibles tipo II sometidos a campos magnéticos rotantes y cruzados ha sido investigado teóricamente aplicando los modelos de estado crítico elíptico [1] y elíptico extendido [2,3]. Específicamente se han explicado y reproducido experimentos en un disco superconductor irreversible y semirreversible de PbBi y PbIn [4], respectivamente. Experimentalmente, el disco se encuentra rotando en presencia de un campo magnético estático  $H_a$  paralelo a sus superficies. Con el fin de llevar a cabo el estudio teórico, se ha explotado la equivalencia entre el experimento y la teoría al mantener el disco fijo y aplicar un campo magnético rotando en sentido opuesto. El efecto de la magnitud  $H_a$  del campo magnético aplicado y su ángulo de rotación  $\alpha_s$  en la magnetización del superconductor es analizado. Cuando  $H_a$  es menor que el campo de penetración  $H_p$ , las componentes de la magnetización, paralela y perpendicular a  $H_a$ , oscilan a medida que el ángulo de rotación se incrementa. Por otro lado, si la magnitud del campo aplicado,  $H_a$ , es mayor que  $H_p$ , las dos componentes de la magnetización se convierten en funciones constantes para valores grandes del ángulo de rotación.

En los cálculos del superconductor semirreversible, el perfil de la inducción magnética inicial, es decir cuando el ángulo de rotación  $\theta=0$ , se obtiene después del enfriamiento en campo. De ésta manera, el perfil es homogéneo en  $T>T_c$  y, en  $T<T_c$  el perfil es alterado debido a un efecto Meissner parcial.

Del mismo modo, se presentan los resultados al aplicar los modelos de estado crítico elíptico y elíptico extendido para explicar experimentos en un disco de PbBi que es magnetizado y posteriormente sometido a un campo magnético perpendicular al flujo atrapado en el interior del superconductor [4]. Adicionalmente, se investiga la respuesta magnética cuando las condiciones iniciales diamagnética y paramagnética son establecidas con el fin de comparar las predicciones de ambos modelos de estado crítico.

- [1] C. Romero-Salazar and F. Pérez-Rodríguez, Appl. Phys. Lett. **83**, 5256 (2003).
- [2] J.R. Clem, Phys. Rev. B **83**, 214511 (2011).
- [3] J.R. Clem, M. Weigand, J.H. Durrell, and A.M. Campbell, Supercond. Sci. Technol. **24**, 6 (2011)
- [4] J. Sekerka, M.Sc. thesis "Flux cutting in semi-reversible and irreversible type II superconductors", University of Ottawa, 1989.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**LUNES 7**

CONFERENCIA 09

**One Phonon Resonant Raman Scattering in Semiconductor Quantum Wires: Magnetic Field Effect**

Re. Betancourt-Riera<sup>a</sup>, Ri. Betancourt-Riera<sup>a</sup>, J.M. Nieto Jalil<sup>b</sup> and R. Riera<sup>c</sup>

- a) Instituto Tecnológico de Hermosillo. Avenida Tecnológico S/N, Col. Sahuaro, C.P. 83170, Hermosillo, Sonora, México. Tel. +52 (662) 260 6450 Fax. +52 (662) 262 0308.
- b) Tecnológico de Monterrey-Campus Sonora Norte. Bulevar Enrique Mazón López No. 965, C.P. 83000, Hermosillo, Sonora, México. Tel./Fax +52 (662) 259 1000.
- c) Departamento de Investigación en Física. Universidad de Sonora. Apdo. Postal 5-088, C.P. 83190, Hermosillo, Sonora, México. Tel./Fax +52 (662) 259 2156.

The electronic structure of nanostructures and other materials can be studied through Raman scattering processes, by considering different polarizations of incident and emitted radiation. Thus, the analysis of the differential cross-section for a Raman scattering allows for the determination of the sub-band structure of the system. This is done by a direct inspection of singularity positions in the spectra, considering the selection rules. The Raman scattering efficiency, in general, shows singularities related to inter-band and intra-band transitions. The Raman spectra has multiple singularities that change position when the electron band structure changes due to the confinement regime or the presence of electric or magnetic fields.

Recently, the electron Raman scattering by means of Fröhlich-type interaction has been investigated in semiconductor quantum wires with and without the presence of magnetic fields. Resonant Raman scattering (RRS) has been investigated in semiconductor quantum wires, and our interest is to analyze the effect of a magnetic field on one phonon resonant Raman scattering. The magnetic field chosen is parallel to the cylinder axis being constant with value zero outside and  $0 < B < B_0$  within, with a circular wire shape. The magnetic field effect is particularly noticeable in the electrons due to the unfolding of electronic bands, breaking the degeneracy existing in the electron sub-band system of a quantum wire; this could be studied with the Raman spectra.

In this paper, we present a theory of one phonon RRS in a semiconductor quantum wire of cylindrical geometry in the presence of an external magnetic field distribution, parallel to the cylinder axis. The effect of the magnetic field in the electron and hole states, and in the Raman scattering efficiency, is determinate. We consider the electron-phonon interaction using a Fröhlich-type Hamiltonian, deduced for the case of complete confinement phonon modes by F. Comas and his collaborators. We also assume  $T = 0$  K, a single parabolic conduction and valence bands. The spectra are discussed for different magnetic field values and the selection rules for the processes are also studied.

Referencias

1. Re. Betancourt-Riera, Ri. Betancourt-Riera, J. M. Nieto Jalil, and R. Riera, *Physica B*, (2012). En prensa, <http://dx.doi.org/10.1016/j.physb.2012.09.062>.
2. R. Betancourt-Riera, R. Riera, R. Rosas, J.M. Nieto, *Physica E* 40 (2008) 785.
3. R. Betancourt-Riera, R. Betancourt, R. Rosas, R. Riera and J. L. Marin, *Physica E*, 24 (2004) 257.
4. Ri. Betancourt-Riera, J.M. Nieto Jalil, Re. Betancourt-Riera and R. Riera, *Revista Mexicana de Física S*, 53 (7) (2007) 116.
5. Ri. Betancourt-Riera, J.M. Nieto Jalil, R. Riera, Re. Betancourt-Riera and R Rosas, *J. Phys.: Condens. Matter*, 20 (2008) 045203.
6. Ri. Betancourt-Riera, J.M. Nieto Jalil, Re. Betancourt-Riera and R. Riera, *Physica B*, 404 (2009) 2468.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 01

**Toward a 50% efficiency in solar cells**

L. Hernández<sup>a</sup>, D. A. Contreras-Solorio<sup>b</sup>, C. I. Cabrera<sup>c</sup>, J.C. Rimada<sup>d</sup>, M. Courel<sup>d</sup>

a: Faculty of Physics. University of Havana. Colina Universitaria. 10400 La Habana, Cuba.

b: Academic Unit of Physics, Autonomous University of Zacatecas, Cza. Solidaridad y Paseo La Bufa S/N, 98060 Zacatecas, Zac., México.

c: Department of Physics, University of Pinar del Río, Martí 270, 20100 Pinar del Río, Cuba.

d: Solar cell laboratory, Institute of Materials Science and Technology (IMRE), University of Havana, Zapata y G, 10400 La Habana, Cuba.

Energy is the lifeblood of technological and economic development. New sources of energy are required and photovoltaic energy is one of the options, which has a beneficial impact on air pollution and global climatic change. There are two approaches to reducing the price for photovoltaic energy: producing cheap materials for so-called flat-plate systems, and increasing the conversion efficiency of solar cells. New types of photovoltaic devices where multiple quantum wells or superlattices are inserted in the i-region of a GaAs p-i-n solar cell will be presented to 6to Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular. A theoretical model has been developed to study the performance of these devices, and our results show that conversion efficiencies can be reached which have never been obtained before for a single-junction solar cell.

The inability of a single-gap solar cell to absorb energies less than the band-gap energy is one of the intrinsic loss mechanisms which limits the conversion efficiency in photovoltaic devices. New approaches to “ultra-high” efficiency solar cells include devices such as multiple quantum wells (MQW) and superlattices systems in the intrinsic region of a p-i-n cell of wider band-gap energy (barrier or host) semiconductor. These configurations are intended to broaden the absorption band beyond the one of the host cell semiconductor. In simple terms, the MQW or SL solar cell (MQWSC, SLSC) is a structure of sandwiched layers between two n and p doped bulk semiconductors.

For the first time, a theoretical model has been performed to study the viability of the superlattice solar cell. Using the Transfer Matrix Method, the conditions for resonant tunneling were established for particular superlattice geometry with variably spaced quantum wells. The effective density of states and the absorption coefficients were calculated to determinate the J-V characteristic. Radiative, non radiative and interface recombination were evaluated from a modeled superlattice solar cell and their values have been compared with a multi-quantum well solar cell.

GaAs solar cells currently retain the world efficiency record for single junction photovoltaic cells. The enhancement of GaAs solar cell efficiency is therefore important to improve solar cell performance, and then to include quantum wells in GaAs, as semiconductor host, would be the best option. However, the lattice mismatch places an upper limit on the number of quantum wells that can be accommodated before strain relaxation takes place, compromising the open circuit voltage. The first attempts included strained GaAs/InGaAs QWSCs, but they have not possessed sufficient quantum well absorption to increase the

short-circuit current to overcome the loss in the open circuit voltage resulting from dislocations. Another more successful approach has been to include strain-balanced GaAsP/InGaAs multiple quantum wells in the intrinsic region. The strain-balanced absorbers constructed with alternate tensile and compressively strained layers have demonstrated remarkably improved photovoltaic performance for the MQW cell design, comparable in efficiency, but non superior, to a homogeneous GaAs control cell. In any case, it has never been included superlattices systems in the intrinsic region of a p-i-n solar cell.

The dilute nitride (GaIn)(NAs) is a novel material system grown lattice matched to GaAs. The band gap of GaAs decreases rapidly with the addition of small atomic fractions of N moreover, the addition of In to GaNAs does not only provide a lattice matched to GaAs, but also decreases the band gap. This property makes very attractive the use of GaInNAs materials to fabricate multiple quantum wells and superlattice to improve the GaAs solar cell conversion efficiency.

The GaAs/GaInNAs MQWSC or SLSC show high conversion efficiency. They make very attractive for space applications or for a triple-junction concentrator cell based on a GaAs/GaInNAs bottom cell that could reach 50% conversion efficiency.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 02

**Study of semiconductor nitrides thin films for photovoltaic (PV) applications**

L.A. Hernández-Hernández<sup>1</sup>, F. de Moure Flores<sup>1,\*</sup>, G. Contreras-Puente<sup>1</sup>, O. de Melo<sup>1,2</sup>, M. López-López<sup>3</sup>, J. Aguilar-Hernández<sup>1</sup>, E. Hernández-Cruz<sup>1</sup>, G. Santana-Rodríguez<sup>4</sup>, R. Mendoza-Pérez<sup>5</sup>, A. Escamilla-Esquivel<sup>1</sup>, L. Zamora<sup>6</sup>

<sup>1</sup>Escuela Superior de Física y Matemáticas-IPN, Mexico City 07738, México, <sup>2</sup>Facultad de Física-Universidad de la Habana, Habana City 10400, Cuba, <sup>3</sup>Centro de Investigación y de Estudios Avanzados-IPN, Mexico City 07360, México, <sup>4</sup>Instituto de Investigaciones en Materiales-UNAM, Mexico City 04510, México, <sup>5</sup>Universidad Autónoma de la Ciudad de Mexico, Mexico City 09790, <sup>6</sup>Centro de Investigaciones en Micro- y Nanotecnologías-Universidad Veracruzana, Veracruz City, Mexico

We present in this work results on semiconductor nitride thin films as grown by Molecular Beam Epitaxy (MBE); Metalorganic Chemical Vapor Deposition (MOCVD), Close Space Vapour Transport (CSV) and Laser Ablation (LA). The films of undoped-, n-, p-type GaN were processed in different substrates. The films were characterized by X-Ray Diffraction (XRD), Scanning Electron Microscopy (SEM); Energy Dispersive Spectroscopy (EDS); Photoluminescence (PL), Raman and Hall Effect technique. The processed films are conformed by substrate/u-GaN or /n-GaN or /p-GaN presenting doping concentrations ranging from  $10^{16}$  -  $10^{18}$  cm<sup>-3</sup>. We carried out also the processing of InN on AlN, thus forming heterojunctions that shows columnar growth and a wurtzite structure. In general the results indicate that the films are suitable for photovoltaic applications. We discuss our results according to the present state of the art of the PV devices of these materials

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 03

**Sistema automatizado para el crecimiento de películas delgadas depositadas por rocío químico neumático**

Osvaldo Delgado-Vasallo, Daniel Jiménez-Olarte, Osvaldo Vigil-Galán

Escuela Superior de Física y Matemáticas-Instituto Politécnico Nacional (IPN)

La técnica de Rocío Químico Neumático, más conocida por su nombre en inglés "Spray Pyrolysis", es una técnica muy versátil, que por su simplicidad y bajo costo en comparación con otras técnicas que emplean sistemas de vacío, es utilizada para depositar películas delgadas de materiales para diversos usos.

En esta técnica, sin embargo, las películas depositadas presentan, por lo general, una relativa alta rugosidad así como no uniformidad en sus espesores, con tendencia a presentar una distribución gaussiana de los mismos. Por otra parte, tan pronto comienza a hacerse rocío sobre el sustrato, la temperatura en su superficie cae drásticamente debido al intercambio térmico de esta con la solución atomizada, con lo cual la temperatura al inicio del depósito difiere de la que se tiene durante el resto del tiempo, trayendo consigo no homogeneidades en las propiedades de las películas depositadas. Aún cuando este último problema se ha tratado de resolver rociando intermitentemente, en la literatura especializada, hasta donde conocemos, no existen reportes de un criterio para establecer los tiempos de rociado y pausa. Además, la temperatura de depósito es generalmente controlada por un control de temperatura que recibe información desde un termopar instalado en el interior de la fuente de calor y no de un sensor de temperaturas que proporcione información sobre la temperatura que se tiene en la superficie del sustrato. Todo ello trae como consecuencia que resulte en extremo difícil mantener un rango óptimo de temperaturas durante todo el tiempo de depósito de las películas.

En este trabajo se presentan resultados preliminares obtenidos en películas de  $\text{SnO}_2$  depositadas por un sistema de Rocío Químico Neumático totalmente automatizado, que fue diseñado con el propósito de solucionar los problemas antes mencionados de esta técnica de depósito. Son presentadas y discutidas las mejoras, tanto en la uniformidad de los espesores como en las propiedades de las películas depositadas bajo condiciones de control automatizado, respecto a las películas crecidas bajo un régimen de control no automatizado.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 04

**Influencia de la concentración de oxígeno en el tratamiento con CdCl<sub>2</sub> sobre las propiedades fotovoltaicas de celdas solares de CdTe/CdS**

E. Regalado-Pérez, X. Mathew

Centro de Investigación en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México  
62580 Temixco, Morelos, México

El efecto del oxígeno en la activación de celdas solares de CdTe/CdS fue estudiado en dispositivos fabricados bajo diferentes concentraciones de O<sub>2</sub> y Ar en el tratamiento con CdCl<sub>2</sub>. Este proceso se llevó a cabo en un reactor de sublimación en espacio cercano, dentro del cual el flujo parcial de oxígeno fue modificado en un rango de 0 a 100 %. Las capas de CdS y CdTe fueron depositadas por baño químico (CBD) y sublimación en espacio cercano (CSS), respectivamente. Las celdas obtenidas fueron caracterizadas por mediciones de corriente-voltaje (J-V), capacitancia-voltaje (C-V) y eficiencia cuántica externa (EQE). Nuestros resultados revelan un incremento importante en la eficiencia de conversión, a través principalmente del V<sub>oc</sub> y el FF, cuando el porcentaje de oxígeno en el tratamiento de activación se incrementa de 0 a 50%. Por su parte, la corriente de oscuridad, asociada comúnmente con el grado de recombinación en la celda solar, se ve reducida cuando aumenta la concentración de oxígeno. El uso de oxígeno resulta también en un incremento en la densidad de portadores en la región del CdTe cercana al contacto eléctrico posterior, que se ve saturada en un valor cercano a  $6 \times 10^{15} \text{ cm}^{-3}$  para la condición O<sub>2</sub>/Ar=50/50. Este valor se ve reducido en dos órdenes de magnitud en la región del bulto del CdTe. El control de la composición de la atmósfera dentro del reactor de activación, permite además obtener una mayor uniformidad en los parámetros fotovoltaicos de las celdas. Las curvas C-V muestran que las celdas solares de CdTe/CdS tienen un comportamiento más parecido a una celda tipo p-i-n que a una tipo p-n. A su vez, los perfiles de dopamiento despliegan una forma de "U", que se ve modificada con la concentración de oxígeno del tratamiento de activación. En estos perfiles, la rama izquierda puede estar asociada con la intermezcla Te/S y/o la presencia de Cu proveniente del contacto eléctrico posterior, mientras la rama derecha está ligada a la presencia del contacto posterior.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 05

**Implicaciones de la Incorporación de Sodio en Puntos Cuánticos de Sulfuro de Bismuto, Usados como Sensibilizadores en Celdas Solares**

Inti Zumeta Dubé\*, David Díaz

Facultad de Química, UNAM, Coyoacán, 04510, México D.F., México.

\*email: intizd@gmail.com

En el presente trabajo se ha abordado el estudio de las celdas solares sensibilizadas con puntos cuánticos de  $\text{Bi}_2\text{S}_3$ . En este estudio se ha logrado una metodología para obtener depósitos de  $\text{Bi}_2\text{S}_3$  sobre la superficie de una capa de  $\text{TiO}_2$  nanoestructurado variando el tamaño de estos. Se encontró que la presencia de iones Na en la solución precursora interfiere con la formación de  $\text{Bi}_2\text{S}_3$  y en su cristalinidad. Se realizó la caracterización de los depósitos obtenidos por DRX, HR-TEM y las espectros copias de dispersión Raman, absorción. Las partículas depositadas presentan un valor de  $E_g$  (1.4 - 2.9 eV) que es superior al del  $\text{Bi}_2\text{S}_3$  macrocristalino (1.3 eV) según sea el tamaño de estas. Esto es debido al efecto de confinamiento cuántico por el pequeño tamaño de éstas. Las celdas solares sensibilizadas, que se obtiene con estas capas, tienen respuesta en una amplia gama del espectro solar. Se encontró que el depósito de una capa delgada de Pt o CoS en el contraelectrodo de FTO mejora el intercambio de carga en él con los pares redox  $\text{I}^-/\text{I}_3^-$  y  $\text{S}^{2-}/\text{S}_x^{2-}$  respectivamente, y permite obtener mayores niveles de fotocorriente y factor de llenado de la curva J-V. La continuación y profundización de este estudio es altamente recomendable para elevar la eficiencia de la celda.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 06

**Escritura laser de películas delgadas de CdTe para interconexión en serie de celdas solares de CdS/CdTe.**

D. Jiménez-Olarte<sup>1</sup>, O. Vigil-Galán<sup>1</sup>, G. Contreras-Puente<sup>1</sup>, M. Villagran-Muniz<sup>2</sup>, J. Santoyo-Morales<sup>1</sup>, C. Sánchez-Aké<sup>2</sup> y F. De Moure-Flores<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Escuela Superior de Física y Matemáticas, IPN, CP 07738, México DF.

<sup>2</sup>Centro de Ciencias Aplicadas y Desarrollo Tecnológico, UNAM, México DF.

Los celdas solares basadas en CdTe tienen la posibilidad de ser divididas en subceldas y ser interconectarlas en serie sin necesidad de cables para formar módulos fotovoltaicos por medio de una serie de rayados secuenciales para aislar y dividir las películas conocidos como P1, P2 y P3 los cuales son alternados con el deposito de las películas que forman la celda solar. Los rayados P1, P2 y P3 en general son llevados a cabo por medio de la escritura láser la cual consiste en la irradiación de una zona específica del material con pulsos de luz láser con el fin de removerla mediante procesos que pueden involucrar vaporización, fusión o fractura.

En este trabajo se presentan los resultados de los experimentos que se realizaron para determinar el umbral de energía necesario para obtener un rayado de 130 $\mu$ m de ancho (P2) en una película de CdTe depositada sobre un substrato de CdS/SnO<sub>2</sub>/vidrio cuando el haz de luz láser incide por el vidrio en la estructura antes mencionada. Finalmente se hace un análisis de la calidad de los rayados para su aplicación en la interconexión en serie de celdas solares de CdS/CdTe. Para realizar los experimentos se utilizó un láser de Nd:YAG con una longitud de onda de 532nm y pulsos del orden de nanosegundos con energía por pulso entre 5 y 300 $\mu$ J.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 07

**Dependencia de la formación de fases secundarias con la composición química en películas delgadas de  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  depositadas por rocío químico neumático**

Maykel Courel Piedrahita, Moisés Espíndola-Rodríguez y Osvaldo Vigil Galán

Escuela Superior de Física y Matemáticas-Instituto Politécnico Nacional (IPN)

El potencial de compuestos del tipo  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  como material absorbente en el procesamiento de celdas solares de segunda generación ha sido demostrado. Esta potencialidad se relaciona con las propiedades físicas de este compuesto que satisfacen los requisitos de un buen absorbente, así como a su composición: el material es compuesto por elementos abundantes y no tóxicos. Las celdas solares de CZTS fabricadas por rutas químicas han mostrado las mayores eficiencias obtenidas hasta el momento. La técnica de rocío químico ha sido una de las rutas químicas utilizada para el depósito de estos compuestos, sin embargo bajos valores de eficiencia han sido reportados hasta el momento utilizando el rocío químico. Independientemente de la técnica de depósito utilizada, ha sido demostrado la influencia de los valores de las relaciones  $\text{Cu}/(\text{Zn}+\text{Sn})$  y  $\text{Zn}/\text{Sn}$  en las eficiencias reportadas, encontrándose que valores en un entorno de 0.95 y 1.25 son los óptimos, los cuales no corresponden al compuesto con composición estequiométrica. Sin embargo, no ha sido establecida la causa de este comportamiento.

En este trabajo presentamos los resultados, donde se demuestra que los valores óptimos reportados para las relaciones de  $\text{Cu}/(\text{Zn}+\text{Sn})$  y  $\text{Zn}/\text{Sn}$  están directamente relacionados a la formación de fases secundarias competitivas a la fundamental CZTS, las cuales degradan las propiedades de las celdas. Las películas fueron caracterizadas por las técnicas de espectrometría Raman y Fluorescencia de Rayos-X. En base a los resultados obtenidos se ha iniciado un programa de depósito de estas películas que garantice a priori la formación mínima de fases secundarias, así como la propuesta de una nueva estructura para el procesamiento de celdas solares policristalinas del tipo  $\text{CdS}/\text{CZTS}$ , en la obtención de dispositivos con alta eficiencia de conversión.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 08

**Material issues in the development of solar cells using evaporated antimony sulfide thin film absorber**

J. Escorcia-García, D. Becerra, M.T.S. Nair, P.K. Nair\*

*Departamento de Materiales Solares, Centro de Investigación en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos 62580, México.*

\* Corresponding author: [pkn@cie.unam.mx](mailto:pkn@cie.unam.mx)

We present results on solar cells developed via thermal evaporation of antimony sulfide ( $\text{Sb}_2\text{S}_3$ ) constituting the structure TCO/CdS/ $\text{Sb}_2\text{S}_3$ . A chemically deposited CdS thin film (100 nm) on commercial transparent conductive oxide (TCO) of  $\text{SnO}_2:\text{F}$  form the window layer and n-side contact. The  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  thin films are produced on glass or on TCO/CdS in a vacuum chamber ( $10^{-5}$  Torr) from a powder source of 99.9% assay placed in a Mo-crucible at 350 °C. Later, the films are heated in nitrogen at 280-300 °C to crystallize the material. An empirical relation between the crystalline film thickness and the mass of the powder source placed in the crucible is 2.4 nm to 1 mg for thickness range, 55-255 nm. The films are characterized using scanning electron microscopy (SEM), grazing incidence X-ray diffraction (GIXRD), UV-NIR spectroscopy, photoconductivity, spectral response and thermoelectric power. The as-deposited thin films are amorphous in nature while the heated films are polycrystalline, with GIXRD pattern resembling that of the mineral *stibnite* in peak positions, but with evidence of preferential orientation with texture coefficient  $> 2$  for certain plains. The crystallite grain diameter in the film is  $\sim 20$  nm, irrespective of film thickness, 115-255 nm. In films of  $< 55$  nm in thickness, the amorphous-crystalline transformation does not take place due to strong substrate-film interaction. Maximum photoconductivity response is observed for films having 115-185 nm, and decreases at lower (amorphous) or higher thicknesses (recombination in non-illuminated area). The spectral response shows that efficient photocarrier generation and collection occurs for the film having 115 nm. For this film thickness, an optical absorption coefficient of  $10^5 \text{ cm}^{-1}$  at photon energy 2-3 eV with direct gap of 1.52 eV (forbidden transitions) is determined, considering multiple internal reflections. A light-generated current density  $16 \text{ mA/cm}^2$  is estimated under AM1.5G solar radiation for this absorber film. In solar cells using this absorber, the open circuit voltage is 670 mV, short-circuit current density  $4.2 \text{ mA/cm}^2$ , and conversion efficiency 1.0 %. The shortfall in  $J_{\text{sc}}$  is ascribed to collection loss in photo-generated carriers due to the small crystallite grain diameters (20 nm), persisting even upon heating the films compared with 2000 nm reported for high efficiency thin film solar cells (though such cells are processed near 500 °C). It is therefore important to increase the crystallite diameter in the  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  absorber through different methodologies in order to improve the cell efficiency.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 09

**La trayectoria hacia celdas solares de alta eficiencia basadas en compuestos  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$**

Osvaldo Vigil Galán

Escuela Superior de Física y Matemáticas-Instituto Politécnico Nacional (IPN)

La opción para desarrollar la tecnología de celdas solares de segunda generación con semiconductores alternativos a los utilizados tradicionalmente basados en los compuestos CdTe y CIGS que estén constituidos por elementos no tóxicos y abundantes y que al mismo tiempo presente propiedades adecuadas por su uso como absorbentes en este tipo de celdas solares ha sido considerada desde varios años. Compuestos con estructura kesterita cumplen con esas expectativas. Celdas solares procesadas con compuestos del tipo  $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$  obtenidas con el uso de rutas químicas han mostrado las mayores eficiencia reportadas de 11.1%, despertando el interés de su futuro procesamiento industrial. El rocío químico neumático es una de las rutas químicas utilizadas en los depósitos de estos compuestos debido a su bajo costo y escalabilidad industrial. El compuesto  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  (CZTS) forma parte de este grupo de compuestos con estructura kesterita con potencial aplicación como material absorbente. A pesar de los numerosos trabajos publicados relacionados con el depósito de películas delgadas de CZTS por rocío químico, pocos trabajos relacionados con la fabricación de celdas solares de basadas en el CZTS depositado por esta técnica se han publicado y los reportados hasta ahora presentan bajos valores de eficiencia. Algunos de los mecanismos relacionados con las características físico- químicas de las películas de CZTS depositadas por rocío químico, así como aquellas referidas a los mecanismos que limitan el funcionamiento de las celdas solares procesadas con estos compuestos requieren una comprensión mejor. En este trabajo un estudio sobre la influencia de los parámetros de crecimiento en las características químicas y físicas de las películas de CZTS depositadas por rocío químico neumático que limitan el funcionamiento de la celda solar es presentado, analizando las desventajas principales de esta técnica con el objetivo de superarlas e identificar los obstáculos que deben ser evaluados en el procesamiento de celdas solares basadas en compuestos con estructura kesterita para incrementar la eficiencia de estos dispositivos.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 10

**Estudio de películas delgadas de ZnO y ZnO:Al depositadas por erosión catódica de RF para su aplicación en celdas solares de película delgada de CIGS/CdS**

F.A. Zubieta López<sup>1</sup>, M. Tufiño Velázquez<sup>1</sup>, A. Morales Acevedo<sup>2</sup>, G. Casados Cruz<sup>2</sup>, G. Contreras Puentes<sup>1</sup> y R. Mendoza-Pérez<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Escuela Superior de Física y Matemáticas-IPN, 07738 México, D. F., México

<sup>2</sup>CINVESTAV-IPN, Departamento de Ingeniería Eléctrica, 07360 México, D. F., México

<sup>3</sup>Universidad Autónoma de la Ciudad de México, 09790 México, D.F., México

En el presente trabajo llevamos a cabo el estudio de las propiedades morfológicas, estructurales y eléctricas de películas delgadas de ZnO y ZnO:Al depositadas por erosión catódica de radio frecuencia (RF Sputtering) para su aplicación en el procesamiento de celdas solares de película delgada de Cu(In,Ga)Se<sub>2</sub> (CIGS). Las películas de ZnO y ZnO:Al fueron depositadas sobre sustratos de vidrio Corning variando las condiciones de depósito como son la potencia de excitación del plasma, la presión de Ar en la cámara de evaporación y la temperatura del sustrato. Se empleó la difracción de rayos-X por haz rasante (GIXRD) para estudiar las propiedades estructurales de las películas de ZnO y ZnO:Al; sus propiedades morfológicas fueron estudiadas por microscopía electrónica de barrido (SEM) y las mediciones de resistividad fueron realizadas por el método típico de cuatro puntas. Las imágenes de SEM muestran que obtuvimos películas de ZnO y ZnO:Al muy uniformes a través de su superficie teniendo un tamaño de grano de 0.2-0.4  $\mu\text{m}$ . Los patrones de GIXRD obtenidos para ZnO muestran una orientación preferencial en la dirección (002) con un pico bien definido de alta intensidad; los patrones correspondientes obtenidos para las películas ZnO:Al muestran tres picos en las direcciones cristalográficas (100), (101) y (110), confirmando una estructura hexagonal para este material. Las mediciones eléctricas muestran que los valores de la resistividad dependen fuertemente de las condiciones de depósito para ambos materiales; la resistividad para el ZnO varía entre  $10^2 - 10^5 \Omega\text{-cm}$  y para el ZnO:Al varía de  $1.0$  a  $3.5 \times 10^{-3} \Omega\text{-cm}$ . Los valores de transmitancia óptica para las películas de ZnO son alrededor del 80-85% y para las películas de ZnO:Al están por arriba del 90%. El ZnO será usado como capa "buffer" mientras que el ZnO:Al como contacto eléctrico frontal para el procesamiento de celdas solares de película delgada de CIGS/CdS.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 11

**Procesamiento de dispositivos fotovoltaicos a base de películas delgadas de  $\text{CuInGaSe}_2$  obtenidas por la técnica de co-evaporación térmica multifuentes**

J. Sastré-Hernández<sup>1</sup>, M. E. Calixto<sup>3</sup>, G. Contreras-Puente<sup>1</sup>, M. Tufiño-Velázquez<sup>1</sup>, A. Morales-Acevedo<sup>2</sup>, G. Casados-Cruz<sup>2</sup> y M. L Albor-Aguilera<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional, 07738 México, D. F., MÉXICO

<sup>2</sup>CINVESTAV-IPN, Departamento de Ingeniería Eléctrica, Av. IPN No. 2508, 07360 México, D. F., MÉXICO

<sup>3</sup>Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apdo. Postal J-48, 72570 Puebla, Pue., MÉXICO.

Las celdas solares a base de películas delgadas de  $\text{CuInGaSe}_2$  (CIGS) siguen siendo atractivas y del interés científico por el bajo costo de las técnicas que pueden ser utilizadas en el procesamiento de películas delgadas que permiten las más altas eficiencias en este tipo de dispositivos fotovoltaicos. El Grupo de Estado Sólido de la ESFM-IPN se une a varios grupos alrededor del mundo en el desarrollo de celdas solares a base de CIGS/CdS con eficiencias superiores del 12% utilizando la coevaporación térmica como técnica experimental de crecimiento de la capa absorbente. El sistema experimental de coevaporación térmica en configuración multifuente está diseñado con celdas de efusión Knudsen tipo MBE para el depósito de películas delgadas de CIGS sobre sustratos de vidrio/Mo de  $2.5 \times 2.5$  cm. En este trabajo reportamos los resultados logrados hasta el momento del depósito y caracterización de películas delgadas de CIGS obtenidas por coevaporación térmica y los resultados de los primeros dispositivos fotovoltaicos fabricados con estas películas de buena calidad. La caracterización de las películas de CIGS coevaporadas fueron analizadas a través de la realización de mediciones de Microscopía Electrónica de Barrido (SEM), Difracción por Rayos-X (DRX), Espectroscopía de Rayos-X de Energía Dispersiva (EDS). La caracterización de los dispositivos se realizó a través de la determinación de las características corriente vs. voltaje y de la Eficiencia Cuántica Externa de las celdas solares realizadas con las películas de CIGS procesadas por coevaporación térmica.

Las mediciones de SEM muestran que las películas tienen aparentemente una buena uniformidad y que los tamaños de grano son del orden de aproximadamente  $1 \mu\text{m}$ . Los resultados de EDS son alentadores en cuanto a que nos permiten mostrar que es posible el control preciso de la composición de las películas delgadas de CIGS, a través de un control aún más preciso de la temperatura de cada elemento presente en la cámara de crecimiento. Después de la fabricación de las celdas solares a base de películas delgadas de CIGS se alcanzó una eficiencia cercana al 11% como la más alta lograda en este trabajo.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 12

**Propiedades físicas de películas delgadas de CdS depositadas por DBQ-Fotoasistido**

M.L. Albor Aguilera<sup>1</sup>, M.A. González Trujillo<sup>2</sup>, J.M. Flores Márquez<sup>1</sup>, R. Acosta Nieto<sup>3</sup>, Y. Matsumoto  
Kuwahara<sup>4</sup>, O. Vigil Galán<sup>1</sup>

<sup>1</sup>ESFM-IPN, Depto. Física, U.P.A.L.M., Zacatenco, México D.F. 07738, México.

<sup>2</sup>ESCOM-IPN, Depto. de Formación Básica, Zacatenco; México D.F. 07738, México.

<sup>3</sup>ESIME-IPN, Control y Automatización, U.P.A.L.M., Zacatenco, México D.F. 07738, México.

<sup>4</sup>CINVESTAV-SEES-IPN, Av. IPN 2508, Zacatenco, México D.F. 07360, México.

E-mail: [lalbor10@yahoo.com.mx](mailto:lalbor10@yahoo.com.mx)

Películas delgadas de CdS fueron depositadas utilizando la técnica DBQ (Depósito por Baño Químico) y DBQ-Fotoasistido; para esta última técnica se utilizó una lámpara UV con una potencia de  $100\text{mW}/\text{cm}^2$ ; esto con el propósito de mejorar las propiedades del material depositado reduciendo los defectos superficiales, lo cual puede mejorar la eficiencia del CdS como material ventana en el desarrollo de celdas solares. Se utilizó como solución precursora  $\text{CdCl}_2$  (0.1M),  $\text{NH}_4\text{Cl}$  (0.2 M),  $\text{NH}_3$  (2 M) y  $(\text{NH}_2)_2\text{CS}$  (0.3 M), una temperatura de  $75^\circ\text{C}$  y tiempos de depósito de 5 min y 10 min. Como sustratos se utilizó vidrio conductor ( $\text{SnO}_2:\text{F}$ ) tratado térmicamente en diferentes atmósferas (Ar,  $\text{O}_2$  y aire). Las propiedades morfológicas, ópticas y eléctricas de las películas delgadas fueron analizadas y se observó que la posición de la lámpara respecto a los sustratos modifica las propiedades en general de las películas obtenidas.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MARTES 8**

CONFERENCIA 13

**Propiedades físicas de películas delgadas de ZnTe para su aplicación como contacto posterior en celdas solares de CdTe**

M.A. González Trujillo<sup>1</sup>, M.L. Albor Aguilera<sup>2</sup>, D.A. Rodríguez Morán<sup>3</sup>, Y. Matsumoto Kuwahara<sup>4</sup>

<sup>1</sup>ESCOM-IPN, Depto. de Ciencias Básicas, U.P.A.L.M., Zacatenco, México D.F., 07738, México,

<sup>2</sup>ESFM-IPN, Depto. Física, U.P.A.L.M., Zacatenco, México D.F. 07738, México.

<sup>3</sup>ESIQIE-IPN, Depto. de Ing. Química Ind., Zacatenco, México D.F. 07738, México.

<sup>4</sup>CINVESTAV-SEES-IPN, Av. IPN 2508, Zacatenco, México D.F. 07360, México.

E-mail: [magthooohoo@yahoo.com.mx](mailto:magthooohoo@yahoo.com.mx)

Películas delgadas de CdTe fueron depositadas por la técnica CSVT (close space vapour transport), las cuales posteriormente fueron sometidas a un tratamiento térmico en una atmósfera de ZnTe en una cámara de grafito cerrada a 550 °C – 650°C durante 5 min., creando de esta manera una región p+ en el CdTe. Las propiedades morfológicas, ópticas y eléctricas de las películas obtenidas fueron estudiadas y se observó que la resistividad del material disminuyó significativamente para las muestras que tienen mayor cantidad de Te, lo cual puede beneficiar la eficiencia de la celda solar del tipo CdS/CdTe.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MIÉRCOLES 9**

CONFERENCIA 01

**Sobre la estructura y estabilidad del complejo (S<sub>2</sub>)<sub>4</sub> con spin cero. Estudios benchmark MP2, CASPT2 y CCSD(T).**

A. Ramírez-Solís, A. Ochoa Calle y R. Hernández-Lamoneda.

Fac. Ciencias y CIQ, UAEM

En base a la unidad cuboide (O<sub>2</sub>)<sub>4</sub> recientemente observada como celda unitaria de la fase epsilon del oxígeno a altas presiones, presentamos los resultados de estudios tipo benchmark de la estructura y la estabilidad del complejo análogo (S<sub>2</sub>)<sub>4</sub>. Dada la enorme dificultad para determinar la energía de interacción del complejo respecto a 4 moléculas de S<sub>2</sub>(tripletes), se utilizaron varios métodos de estructura electrónica, dos monoreferenciales (MP2 y CCSD(T)) y dos multireferenciales (CASPT2 y un método MR híbrido). Se aplica la extrapolación al límite de base completa para los parámetros geométricos y energéticos de la reacción. Encontramos que la distancia intermolecular es menor que en (O<sub>2</sub>)<sub>4</sub> y que la distancia S-S intramolecular se mantiene casi igual a la de la molécula S<sub>2</sub>(triplete Sigma<sub>g</sub>) aislada. La energía de interacción es al menos 23 veces mayor que para el caso de (O<sub>2</sub>)<sub>4</sub>, lo que demuestra que la especie de azufre no surge por interacciones tipo van der Waals, como ocurre en el oxígeno. Mientras que el análisis vibracional a nivel MP2/cc-pVnZ (2,3,4) revela que el complejo es estable, al nivel CCSD/AVnZ (n=2,3) el complejo presenta una frecuencia imaginaria que lleva a dos estructuras degeneradas tipo bote conocidas como mínimos locales a nivel B3LYP. Se discuten los resultados a la luz de un detallado análisis de la evolución de la función de onda contra la distancia intermolecular y se presentan perspectivas futuras.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MIÉRCOLES 9**

CONFERENCIA 02

**La presencia de especies ocluidas, puede revertir la estabilidad de dos zeolitas durante la cristalización?**  
**Los casos de Theta-1 e ITQ-12 puramente silícicas**

Claudio M. Zicovich-Wilson

Facultad de Ciencias, U. Autónoma del Estado de Morelos Cuernavaca (MOR), Mexico.

Los tamices moleculares puramente silícicos son materiales interesantes para procesos industriales que involucran la separación de mezclas gaseosas. Este es el caso de SiO<sub>2</sub>-ITQ-121 que ha mostrado ser particularmente eficiente y limpio desde el punto de vista ambiental en la separación de mezclas propano-propeno como alternativa a las técnicas de destilación.<sup>2,3</sup> A pesar de este interés, el diseño de métodos de síntesis para tales materiales es una tarea complicada debido a la falta de conocimiento de los fenómenos microscópicos que gobiernan la cristalización de las diferentes fases en competición.

Este trabajo es un aporte teórico en tal sentido. Se muestra que una red zeolítica bastante estable, SiO<sub>2</sub>-θ-1, se transforma in situ en otra menos estable, SiO<sub>2</sub>-ITQ-12, en virtud de la presencia de especies ocluidas. La transformación se explica teóricamente mediante el uso de técnicas computacionales ab initio implementadas en el programa CRYSTAL para el cálculo de sistemas cristalinos.<sup>4,5</sup>

Referencias

- [1] Boix, T.; Puche, M.; Cambor, M. A.; Corma, A., U.S. Patent 6 471 939 2002.
- [2] Barrett, P. A.; Boix, T.; Puche, M.; Olson, D. H.; Jordan, E.; Koller, H.; Cambor, M. A., Chem. Comm. 2003, 2114.
- [3] Olson, D. H.; Yang, X.; Cambor, M. A., J. Phys. Chem. B 2004, 108, 11044.
- [4] Dovesi, R.; Saunders, V. R.; Roetti, C.; Orlando, R.; Zicovich-Wilson, C. M.; Pascale, F.; Civalleri, B.; Doll, K.; Harrison, N. M.; Bush, I. J.; Arco, P. D.; Llunell, M., CRYSTAL09 Users Manual, University of Turin: Turin, 2009, see <http://www.crystal.unito.it>.
- [5] The CRYSTAL Web Page, URL <http://www.crystal.unito.it/>.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MIÉRCOLES 9**

CONFERENCIA 03

**¿Qué hace a un dominio monomérico de inmunoglobulina formar fibras amiloides?**

Nina Pastor<sup>1</sup>, Jessica Araujo<sup>1</sup>, Diana Valenzo<sup>1</sup>, César Millán<sup>1</sup>, y Alejandro Fernández<sup>2</sup>

1: Facultad de Ciencias, UAEM; 2: Facultad de Medicina, UNAM

Las cadenas ligeras de anticuerpos están hechas de dos dominios, variable y constante, que se asocian con cadenas pesadas para constituir anticuerpos funcionales. En una colección de enfermedades de células B se produce un exceso de cadenas ligeras. Estas cadenas forman varios tipos de agregados, entre los cuales se encuentran las fibras amiloides. Dado este caso, resulta una enfermedad que afecta múltiples órganos, llamada amiloidosis de cadena ligera o AL. La estructura de las proteínas aisladas de pacientes es indistinguible de la de proteínas aisladas de personas sanas; muchas de las proteínas de pacientes resultan menos estables que las de individuos sanos, y por eso se ha propuesto que hay una relación entre baja estabilidad y amiloidogénesis. El estado nativo no se agrega formando fibras, por lo que se ha propuesto que existe un intermediario de plegamiento, de estructura desconocida, como bloque estructural de la fibra amiloide.

Proponemos que los dominios variables de inmunoglobulinas amiloidogénicas pueden formar fibras amiloides combinando cualesquiera de los siguientes atributos no excluyentes:

- a) baja estabilidad termodinámica, que favorece la desnaturalización local o global
- b) baja diversidad estructural en los ensambles conformacionales visitados durante la desnaturalización, que permite la población frecuente de monómeros proclives a la agregación
- c) colección de interacciones no nativas que estabilizan selectivamente a los monómeros proclives a la agregación, haciendo mayor su probabilidad de existencia
- d) muchas superficies viables para polimerizar en los monómeros, lo que maximiza la probabilidad de generar y extender fibras
- e) protofibras estables que pueden vivir el tiempo suficiente para progresar hasta ser fibras

Probamos la relevancia relativa de estas cinco contribuciones para un conjunto de cuatro dominios variables de la clase  $\lambda 6a$ , una de las más comunes en AL. Hicimos simulaciones por dinámica molecular bajo condiciones nativas y a alta temperatura de los monómeros. De las dinámicas identificamos posibles intermediarios, mismos que usamos para hacer acoplamiento molecular para armar protofibras, y las simulamos por dinámica molecular para relajarlas. Para la variante más amiloidogénica, encontramos que aparentemente usa las cinco contribuciones.

Agradecimientos: tiempo de cómputo en KanBalam (UNAM) y Centro Nacional de Supercómputo (IPICYT)

Financiamiento: CONACyT 133294.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MIÉRCOLES 9**

CONFERENCIA 04

**Investigación de gases electronegativos en descarga de cátodo hueco**

J Rodríguez<sup>1</sup>, FB Yousif<sup>1</sup>, AB Mondragon<sup>1</sup>, B Fuentes<sup>2</sup>, F. Vazquez<sup>1</sup> and R. Díaz<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Facultad de Ciencias-UAEM, Av. Universidad, C.P. 62210, Cuernavaca, Morelos, México.

<sup>2</sup> Facultad de Ciencias-UNAM, México, México.

Esta presentación plantea la investigación de la medición de la densidad de iones positivos empleando una descarga en el cátodo hueco en plasmas electronegativos. Los métodos usados son: el Criterio de Bohm, Movimiento Orbital Limitado (OML), Balance de Corriente (CB) y el método de Potencial Flotante (FP). Todos los métodos mencionados están basados en el aprovechamiento de la corriente de saturación de los iones positivos en las curvas I-V.

Nuestros resultados identifican al método FP como el más adecuado para la evaluación de la densidad de los iones positivos usando el lado positivo de las curvas I-V. La temperatura electrónica fue medida en función de la presión usando el crecimiento exponencial en la corriente electrónica así como también en el método FP tomando la corriente de saturación de los iones positivos en las curvas I-V, ambos resultados fueron compatibles dando crédito al método FP.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MIÉRCOLES 9**

CONFERENCIA 05

**Amine adsorption in copper succinate**

J. Balmaseda<sup>1</sup>, B. Torruco<sup>1</sup>, P. Vera-Cruz<sup>1</sup>, L. F. del Castillo<sup>1</sup> and M. Bastarrechea<sup>2</sup>.

1. Departamento de Polímeros, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, México, D.F. C.P. 04510, balmaseda@iim.unam.mx
2. Instituto de Ciencia y Tecnología de Materiales, Universidad de La Habana. San Lázaro IL CP 10400 Ciudad Habana, Cuba.

**Objective:** The aim of this work is to obtain different copper aminosuccinates in heterogeneous conditions and develop a kinetic equation that describes the water and amine TPD experiments.

**Methods:** The copper succinate hydrated,  $\text{Cu}_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4) \cdot 2.4\text{H}_2\text{O}$  was obtained as follows: the succinic acid (0.5904 g; 0.1 mmol) was dissolved in water ( $\text{H}_2\text{O}$ , 50 mL) and 1N NaOH (10 mL) was droplets added, the copper chloride (0.8524 g; 0.1 mmol) was also dissolved in water ( $\text{H}_2\text{O}$ , 50 mL). The pH of the mixture was 6.4. The reaction was carried out at 25°C for 3 days, afforded small blue crystals that were washed with water, and dried at air. The dehydrated copper succinate,  $\text{Cu}_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4)_2$  was obtained from the dehydration phase 1, carried out in AutoChem 2910 sample tube as TPD experiment with a heating rate of 10°C min<sup>-1</sup> up to 120°C, at an air flow of 30 mL min<sup>-1</sup> for 60 min. Subsequently, phase 2 was saturated under a 10 mL min<sup>-1</sup> stream of gaseous ammonia for 30 min. The ammonia saturated sample (copper aminosuccinate,  $\text{Cu}_2(\text{C}_4\text{H}_4\text{O}_4) \cdot 2.4\text{NH}_3$ ) has an intense electric blue color. Ammonia TPD was then run heating the copper aminosuccinate at 5°C min<sup>-1</sup> up to 220°C under a 10 mL min<sup>-1</sup> hydrogen flow. Fourier transform infrared spectroscopy was performed using Nicolet FT-IR 6700 spectrometer in ATR mode. X-ray powder diffraction patterns were obtained using a Bruker-D8 Advance diffractometer equipped with Cu tube, a primary germanium monochromator and a Vantec-1 detector. TG curves were collected from room temperature to 800°C at a heating rate of 10°C min<sup>-1</sup>, under N<sub>2</sub> flow (100 mL min<sup>-1</sup>) using a TA instrument thermobalance (TGA 2950) operated in the high-resolution mode.

**Results:** The IR spectra of copper aminosuccinate shows three bands centered at about 3325-3200 cm<sup>-1</sup> due to coordination of ammonia. A shoulder at 2945 cm<sup>-1</sup> is assigned to  $\nu_{\text{C-H}}$  of succinate ligand. A strong band at 1558 cm<sup>-1</sup> is due to  $\nu_{\text{asym}}(\text{C=O})$  whereas a sharp band at 1403 cm<sup>-1</sup> along with a shoulder at 1372 cm<sup>-1</sup> is attributed to  $\nu_{\text{sym}}(\text{C=O})$  of succinate group. Bands in the frequencies 1633 and 1204 cm<sup>-1</sup> correspond to  $\nu_{\text{as}}(\text{H-N-H})$  rocking mode. The band in 464 cm<sup>-1</sup> indicates the presence of Cu-O (carboxylate) bonding. The IR spectra of other amino-succinates complexes are similar; they show two main events: the first, a shift in the frequency band of the asymmetric rocking mode toward slightly lower, which is due to the  $\nu_{\text{as}}(\text{H-N-H})$  bond is weakened under the coordination of Cu-N and the second a shift in the band of metal-oxygen coordination (Cu-O) to slightly higher frequencies, which due to the coordination of Cu to the N of the amine present. Two thermal events are present in TGA curves. The first one is associated to the dehydration process, while the second is related to the framework decomposition.

According to crystal structure [1], the water molecules system can be considered as a macrocanonical ensemble of subsystems formed by two coordinated molecules and two hydrogen bonded to them. From this model an isotherm equation was derived. Besides, a kinetic equation describing water and ammonia TPD experiments was developed inserting this model in the statistical rate theory [2]. The energy of adsorption of coordinated and hydrogen bonded molecules was estimated fitting the kinetic equation to experimental data.

References:

1. Ang, S.G., B.W. Sun, and S. Gao, Synthesis, crystal structures and magnetic properties of one- and two-dimensional copper(II) complexes bridged by succinate. *Inorganic Chemistry Communications*, 2004. 7(6): p. 795-798.
2. Pancyk, T. and W. Rudzinski, Phenomenological Kinetics of Real Gas-Adsorption-Systems: Isothermal Kinetics and Kinetics of Thermodesorption. *Journal of Non-Equilibrium Thermodynamics*, 2003. 28(4): p. 341-397.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**MIÉRCOLES 9**

CONFERENCIA 06

**Condensed exciton-polaritons in a 2D trap: elementary excitations and shaping by Gaussian pump beam**

C. Trallero-Giner

Centro Brasileiro de Pesquisas Fisicas - Rua Xavier Sigaud 150, 22290-180 Rio de Janeiro-RJ, Brazil

Bose-Einstein condensate (BEC) of exciton-polaritons in a semiconductor microcavity can be confined in a parabolic lateral trap induced by local elastic strain [1]. The stationary properties of the condensate can be described by the Gross-Pitaevskii equation (GPE). In the realistic limit of weakly interacting polaritons, the non-linear term in GPE can be considered as a perturbation with respect to the potential of the trap, which allows for a convenient analytical description of the BEC ground state [2]. In this work we use a similar approach in order to obtain excited states of the condensate confined in a 2D harmonic potential trap.

Assuming that the BEC is linear-polarized, a typical experimental situation, the spinor nature of the polaritons can be neglected and the scalar GPE can be used. Accordingly, elementary excitations of the ground state can be described by two coupled Bogolyubov equations with space-dependent density. The interaction partially lifts the degeneracy related to the axial symmetry of the trapping potential. We derive a complete set of phonon-type modes with the energies depending on the exciton-exciton interaction parameter and calculate the persistent current density for the states with nonzero angular momentum. This set of states can be used to describe the dynamics of the polariton BEC, for instance, vortices and their interaction [3]. Also,

The effect of the repulsive potential produced by uncondensed excitons generated by a pump beam focused in the center of the trap is considered

[1] R. Balili et al, Science 316, 1007 (2007)

[2] C. Trallero-Giner, T. C. H. Liew and A. V. Kavokin, Phys. Rev. B 82, 165421 (2010)

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

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013  
MIÉRCOLES 9**

CONFERENCIA 07

**La Sociedad Cubana de Física hoy**

Augusto González García

Presidente de la Sociedad Cubana de Física

Inst. de Cibernética, Matemática y Física, La Habana

Se presenta un resumen de las principales acciones desarrolladas por la Sociedad Cubana de Física en los últimos 20 meses: conferencias organizadas, relanzamiento de la Revista Cubana de Física y de las páginas *web* de la sociedad, actualización de su membresía, actividades de divulgación científica, etc.

Por otro lado, se esbozan los principales desafíos para el futuro inmediato y los pasos que se están dando para abordarlos.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013  
MIÉRCOLES 9**

CONFERENCIA 08

**Proyección del CLAF para los próximos años**

C. Trallero-Giner

Centro Latinoamericano de Física, Rio de Janeiro

Centro Brasileiro de Pesquisas Físicas, Rio de Janeiro

Se realiza un análisis de la presente situación del Centro Latinoamericano de Física (CLAF) y su relación con las actuales necesidades de desarrollo de la región. Se enumeran los aportes del organismo, su rasgo distintivo, los diferentes tipos de formación de personal de posgrado y los vínculos con diversos organismos que mantiene el CLAF en la actualidad. La proyección y programas del organismo hacia América Latina y Centro América son presentados haciendo énfasis en el apoyo a la física experimental al igual que la búsqueda de políticas científicas conjuntas entre los diversos órganos análogos al CLAF. Se destaca la importancia de la enseñanza de la física como elemento central para la obtención de una Ciencia Física de mayor calidad.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**  
**JUEVES 10**  
**(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)**

CONFERENCIA 01

**Incremento de la Biodegradabilidad de aguas residuales contaminadas con azul índigo por medio de Foto-Fenton asistido con iones Ferrioxalato**

Rubén Vásquez Medrano<sup>1</sup>, Michel Vedrenne<sup>1</sup>, Dorian Prato<sup>1</sup>, Bernardo Frontana<sup>2</sup> y Margarita Hernández<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> Departamento de Ingeniería y Ciencias Químicas, Universidad Iberoamericana, Ciudad de México.

<sup>2</sup> Centro Conjunto de Investigación en Química Sustentable UAEM-UNAM.

En este estudio se evaluó el proceso de foto-Fenton asistido con iones de oxalato ferroso para incrementar la biodegradabilidad de las aguas residuales contaminadas con colorante de azul índigo, para que posteriormente pueda ser tratada por medio de procesos biológicos convencionales. El tratamiento fotoquímico se llevó a cabo usando iones de oxalato ferroso y peróxido de hidrógeno en un Concentrador Parabólico Compuesto (CPC) en condiciones batch. Con el propósito de optimizar la degradación del colorante, se realizó un diseño de experimentos de superficie de respuesta. Las reacciones se efectuaron al pH natural del efluente (5-6) con concentraciones de azul índigo de 7-35 ppm, usando una relación fija entre el oxalato y los iones ferrosos ( $C_2O_4^{2-}/Fe^{2+}$ ) de 35.; las concentraciones de peróxido de hidrógeno fueron entre 257 mg/L-1280 mg/L. Los resultados mostraron que la mayor remoción de carbono orgánico total se logró con las más bajas concentraciones de peróxido de hidrógeno. En general, se observó que después de los 20 kJ/L emitidos, la biodegradabilidad ( $BOD_5/COD$ ) fue de 0.4. El incremento en la biodegradabilidad se confirmó por la presencia de productos intermediarios de cadena corta y por la mineralización del nitrógeno orgánico a nitrato. Finalmente, en el estudio de toxicidad con *Artemia* salina se confirmó la detoxificación del efluente.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013  
JUEVES 10  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)**

CONFERENCIA 02

**Inestabilidad de Jeans y formación de estructuras en un gas diluido bajo la consideración de dos posibles ecuaciones constitutivas para el flujo de calor**

Humberto Mondragón Suárez

Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana, Prol. Paseo de la reforma 880, Lomas de Santa fe 01219, Alvaro Obregón México D.F.

Se abordan dos perspectivas del problema de la formación de estructuras en campos gravitacionales, considerando fluctuaciones de la densidad de masa en un fluido simple, disipativo y relativista. La primera corresponde al formalismo propuesto por Eckart, e involucra una ecuación constitutiva para el flujo de calor propuesta fenomenológicamente, dependiente de la aceleración hidrodinámica. Se muestra que dicha dependencia genera incompatibilidades con las teorías aceptadas actualmente respecto a la formación de estructuras celestes. En la segunda alternativa incluida en este trabajo, se establece una ecuación constitutiva para el flujo de calor con base en la teoría cinética. La expresión correspondiente excluye a la dependencia con la aceleración hidrodinámica, la cual es reemplazada por gradientes espaciales de las variables termodinámicas locales. Los resultados obtenidos se vuelven compatibles con las observaciones realizadas y son consistentes con los modelos clásicos en el límite no relativista. Una implicación directa de este formalismo corresponde a la posibilidad de aplicar las teorías de primer orden en los gradientes a la descripción de fluidos en el marco de la relatividad especial. Dichos sistemas han adquirido un interés creciente en el marco de la formación de plasmas de alta temperatura producto de colisiones entre iones pesados (RHIC).

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013  
JUEVES 10  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)**

CONFERENCIA 03

**Hidrogeles biopoliméricos aplicados en agricultura**

D. Lemus, E Sánchez-Aguilera y R.F. Estrada.

Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana, Prol. Paseo de la reforma 880, Lomas de Santa fe 01219, Alvaro Obregón México D.F.

En este trabajo se estudia el comportamiento de hidrogeles absorbentes hechos con distintas concentraciones de grenetina para después modificarlos con ácido poliacrílico de diferentes pesos moleculares, posteriormente a estos hidrogeles se les incorpora nanotubos de carbono para evaluar sus propiedades absorbentes y su posible aplicación en el área de la agricultura. Dichos hidrogeles presentan propiedades de retención-liberación reversible de agua que pueden adaptarse a sistemas que necesiten de una liberación controlada de la misma. El análisis se llevó a cabo por medio de pruebas de retención-liberación de agua sumergiendo el hidrogel a diferentes intervalos de tiempo, una vez que el hidrogel ha absorbido agua se seca en un simulador de secado solar, por diferencia de pesos se mide la cantidad de agua retenida durante la inmersión y la cantidad de agua liberada durante el secado. La caracterización superficial de estos materiales se hizo mediante microscopia electrónica de barrido de bajo vacío en un equipo Jeol L.V. 5600. Los resultados del estudio comparativo nos mostraron que los hidrogeles modificados con nanotubos presentan mayor capacidad de retención de agua comparados con sus homólogos a los que no se les incorporó nanotubos de carbono y que hidrogeles de concentraciones del orden de 0.25% de nanotubos presentan formación de cavidades porosas.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013  
JUEVES 10  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)**

CONFERENCIA 04

**Transiciones de Fase en una Malla Transitoria**

Eduardo Rincón Aguilar

Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana,

Diversos materiales poseen propiedades como resistencia a la deformación, conductividad eléctrica, térmica etc. Estas características cambian al variar las condiciones del medio o por la aplicación de una fuerza externa. La respuesta del material ante diferentes condiciones, lo pueden hacer especialmente útil para aplicaciones específicas, así, por ejemplo un material puede volverse más resistente ante la aplicación de una fuerza externa o disminuir su resistencia al paso de la corriente en función de la temperatura. Estas fases pueden ser obtenidas al mezclar diferentes sustancias, para encontrar una composición "ideal" se requiere hacer una gran cantidad de experimentos, pero si conocemos los mecanismos que producen este comportamiento podemos minimizar estas pruebas y encontrar la mezcla más adecuada para una aplicación específica. En este trabajo se presenta un modelo para un polímero lineal que al ser sometido a la acción de una fuerza externa absorbe la energía mecánica y forma nodos creando así una red más densa "resistente". El modelo consiste en cinco microestados básicos cuya combinación representa cualquier configuración que el sistema puede adquirir, las concentraciones de estos microestados se representan con ecuaciones cinéticas donde por un lado la fuerza externa incrementa el número de nodos y en sentido inverso de la energía de restauración (agitación térmica) disminuye el número de estos nodos. El modelo está resuelto para flujo cortante simple. Este modelo ha descrito con éxito propiedades como la tixotropía incluso en sistemas con varios cruces y la curva cúbica en el esfuerzo de deformación para la transición de fase desorden-orden que muchos sistemas que poseen estructura variable presentan.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013  
JUEVES 10  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)**

CONFERENCIA 05

**Extensión de la ley de Tolman a sistemas relativistas fuera de equilibrio termodinámico**

Brun-Battistini

Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana, Prol. Paseo de la reforma 880, Lomas de Santa fe 01219, Alvaro Obregón México D.F.

Actualmente no existe un consenso referente a la forma correcta de describir acoplamientos entre flujos y fuerzas termodinámicas para fluidos de muy altas temperaturas. En este caso se deduce, a través de argumentos de la teoría cinética relativista, la expresión que acopla el flujo de calor con un campo gravitacional débil. El formalismo recupera la ley de Tolman en el límite no relativista y permite extender por primera vez el resultado a sistemas fuera de equilibrio termodinámico en el caso relativista.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013  
JUEVES 10  
(SEDE UNIVERSIDAD IBEROAMERICANA. MÉXICO DF)**

CONFERENCIA 06

**Aprovechamiento integral de la corriente eléctrica en celdas electroquímicas**

Jorge G. Ibáñez-Cornejo

Departamento de Ingeniería y Ciencias Químicas, Universidad Iberoamericana, Ciudad de México.

Es frecuente que en los procesos electroquímicos se desperdicie la mitad de la corriente al enfocarse solamente en el proceso de interés y permitir que en el contraelectrodo se descomponga el solvente y se desperdicie(n) el (los) producto(s). Se discutirán varios procesos en los cuales se busca que la corriente se use en ambos lados para generar productos útiles.

## **TÍTULOS Y RESÚMENES DE LOS CARTELES**



**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 01

**Problema de Coeficiente de Transmisión y Escape en Sistemas Unidimensionales con perfil de Potencial Gaussiano y Barreras Regulares**

María de la Luz Silba-Vélez<sup>1</sup>, R. Pérez Álvarez<sup>1</sup> y D. A. Contreras-Solorio<sup>2</sup>.

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

2: Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas. Zacatecas, México.

Los avances tecnológicos de las últimas décadas se han enfocado en el estudio de sistemas formados por materiales semiconductores llamados heteroestructuras (sistemas a capas de dos o más semiconductores con diferente ancho de banda prohibida (gap)). Dichos sistemas tienen gran impacto en diversas áreas, por ejemplo: en comunicación, diseño de láseres, almacenamiento de información, dispositivos ahorradores de energía, entre otros. Por tanto, es de gran interés el entendimiento de sus propiedades ópticas y electrónicas. A lo largo de este trabajo se estudian los problemas de coeficiente de transmisión y escape en estructuras formadas por perfiles de potencial gaussiano y de barreras de potencial regulares. Dicho estudio se realiza bajo el marco de la llamada teoría de masa efectiva donde para resolver los problemas mencionados se recurre al formalismo de matrices de transferencia. Cabe hacer mención que el comportamiento de los electrones en una región del espacio no sólo depende del potencial local en tal región sino por la presencia de los otros potenciales vecinos, por tanto resulta interesante comparar entre diferentes sistemas. En el caso de sistemas gaussianos observamos que el coeficiente de transmisión muestra zonas (intervalos) de transparencia mientras que en el caso de barreras regulares esto no ocurre. Resuelto el problema de escape para los mismos sistemas donde la energía es compleja ( $E = E_r + i \Gamma$ ) tenemos que si se comparan con el coeficiente de transmisión se observa que las  $E_r$  con un ancho  $(-\Gamma/2, \Gamma/2)$  se localizan cercanas a las zonas de transparencia indicando que esto no es una propiedad exacta.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 02

**Estudio de la predisociación vibracional en el complejo Br<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O y cálculos de correlación local en agregados Br<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>n=4</sub>**

F. A. Batista-Romero<sup>1,2</sup>, R. Hernández-Lamonedá<sup>1</sup>, P. Pajón-Suárez<sup>2</sup>, J. Rubayo-Soneira<sup>2</sup>

1: Centro de Investigaciones Químicas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, México.

2: Instituto Superior de Tecnologías y Ciencias Aplicadas, La Habana, Cuba.

Del complejo Br<sub>2</sub>-H<sub>2</sub>O se ha estudiado la superficie de energía potencial en dos dimensiones del estado fundamental y de los estados de valencia excitados, así como las geometrías de mínima energía de dicho sistema<sup>1</sup>. También se han realizados estudios ab initio de los grandes corrimientos y pequeños ensanchamientos en las bandas de valencia del Br<sub>2</sub> con respecto a la formación del dímero con el agua<sup>2</sup>. Sin embargo no se conoce nada de los tiempos de vida media del complejo cuando se encuentra en un estado excitado. Esta información será de gran utilidad en la planeación de experimentos para determinar la dinámica de predisociación vibracional del sistema. La metodología de las trayectorias cuasi-clásicas se puede emplear para determinar el tiempo que demora el complejo en disociarse. Las condiciones iniciales se toman según cálculos cuánticos debido a que el movimiento vibratorio del complejo es de naturaleza cuántica; sin embargo la propagación de las trayectorias se simulan de manera clásica, resolviendo las ecuaciones de Hamilton de la mecánica. Una vez obtenidas todas las trayectorias correspondientes a cada una de las poblaciones iniciales, entonces se determinan los tiempos de vida media para cada uno de los estados que se excitaron inicialmente, los principales mecanismos de transferencia de energía y los estados cuánticos finales. También estamos interesados en realizar cálculos ab initio para agregados de mayor tamaño incluidas celdas de agua características de clatratos de bromo, que han sido objeto de una gran variedad de estudios espectroscópicos <sup>3,4</sup>. En estos experimentos se han medido corrimientos en los espectros vibracionales y electrónicos para el bromo en celdas de distintos tamaños así como en hielo y en solución acuosa. Todos estos resultados requieren de una interpretación teórica. Para ello se han empleado métodos de correlación local y como una primera prueba se analiza el caso de agregados que ya han sido estudiados con métodos convencionales<sup>5</sup>. Además se demuestra que con estos métodos se elimina el error de superposición de bases, lo cual es imprescindible para realizar cálculos espectroscópicos. En esta presentación mostramos los avances obtenidos hasta el momento en los problemas mencionados anteriormente.

#### BIBLIOGRAFÍA

1. Hernández-Lamonedá, R.; Uc Rosas, V. H.; Bernal Uruchurtu, M. I.; Halberstadt, N.; Janda, K. C.; J. Phys. Chem. A 2008, 112, 89-96.
2. Franklin-Mergarejo, R.; Rubayo-Soneira, J.; Halberstadt, N.; Ayed, T.; Bernal Uruchurtu, M. I.; Hernández-Lamonedá, R.; Janda, K. J.; J. Phys. Chem. A 2009, 113, 7563–7569
3. González-Martínez, M. L.; Rubayo-Soneira, J.; Janda, K.; Phys. Chem. Chem. Phys., 2006, 8, 4550–4558.
4. Udachin, K. A.; Enright, G. D.; Ratcliffe, C. I.; Ripmeester, J. A.; J. Am. Chem. Soc. 1997, 119, 11481-11486

5. Janda, K. C.; Kerenskaya, G.; Goldscheleger, U. I.; Apkarian, V. A.; Fleischer, E. B.; Proc. of the 6th Inter. Conf. on Gas Hyd. Jul 6-10, 2008.
6. Bernal Uruchurtu, M. I; Hernández-Lamoneda, R.; Janda, K. C; J. Phys.Chem.A, 2009, 113, 5496-5503

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 03

**Uso del retrato fase para el análisis de curvas de transmitancia cuántica.**

Díaz-Guerrero D. S., Gaggero-Sager L. M.

Facultad de Ciencias, UAEM

El coeficiente de transmisión cuántico ha sido de gran utilidad para el estudio de diferentes tipos de sistemas multicapa, sin embargo el análisis de este tipo de curvas resulta muy complicado debido, entre otros factores, a la diversidad de combinaciones de los parámetros disponibles. En este trabajo mostramos algunos resultados de cálculos de coeficiente de transmisión y sus respectivos retratos fase. Estos resultados nos permiten considerar al retrato fase como una herramienta para analizar el tipo de evolución de cada curva en función de la energía. Adicionalmente permite una clasificación cualitativa de las curvas en relación al tipo de sistema multicapa.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 04

**Transiciones electrónicas en pozos cuánticos dobles: Efectos del campo eléctrico y la concentración de aluminio**

Ricardo L. Restrepo<sup>1,2</sup>, Walter Ospina<sup>1</sup>, Eugenio Giraldo<sup>1</sup>, Guillermo L. Miranda<sup>1,2</sup>, Miguel E. Mora-Ramos<sup>1,3</sup>,  
Carlos A. Duque<sup>2</sup>

1 Escuela de Ingeniería de Antioquia, A.A 7516 Medellín, Colombia.

2 Instituto de Física, Universidad de Antioquia, A.A.1226, Medellín, Colombia.

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

Un estudio de la energía de electrones y huecos bajo los efectos simultáneos de la concentración de aluminio y del campo eléctrico aplicado en la dirección crecimiento para partículas simples en pozos cuánticos dobles acoplados de GaAs/(Ga, Al)As se presenta en este trabajo. Los cálculos teóricos se han realizado en el marco de la masa efectiva, la aproximación de banda parabólica y usando un procedimiento variacional. Se considera un conjunto completo de funciones trigonométricas para las funciones de onda del electrón y del hueco. Un pozo cuántico doble acoplado es una heteroestructura semiconductor que consta de dos pozos cuánticos separados por una barrera delgada. En el caso de pozos simétricos las funciones de onda propias de los portadores en la heteroestructura tienen simetrías bien definidas y las transiciones ópticas sólo son permitidas entre los estados de electrones y de huecos con la misma simetría. Esta condición puede ser revertida, por ejemplo, mediante la inclusión de la variación de la concentración de aluminio o de un campo eléctrico aplicado en la dirección de crecimiento de la heteroestructura o ambos efectos, y son responsables de la ruptura de las simetrías. Los resultados muestran que la concentración de aluminio y el campo eléctrico aplicado son herramientas útiles para sintonizar las transiciones excitónicas directas e indirectas en el semiconductor.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**

POSTER 05

**Absorción óptica no lineal de impurezas donadoras en anillos cuánticos semiconductores**

Ricardo L. Restrepo<sup>1,4</sup>, M. E. Mora-Ramos<sup>1,2</sup>, M. G. Barseghyan<sup>3</sup>, C. A. Duque<sup>4</sup>

1 Escuela de Ingeniería de Antioquia, A.A 7516 Medellín, Colombia.

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

3 Department of Solid State Physics, Yerevan State University, Yerevan, Armenia 4Instituto de Física,  
Universidad de Antioquia, A.A.1226, Medellín, Colombia.

Se estudian los efectos del potencial de confinamiento sobre la energía de enlace de una impureza donadora poco profunda aplicando cambios en las dimensiones de los radios interior y exterior en un anillo cuántico semiconductor de GaAs, se obtienen los coeficientes de absorción óptica lineal y no lineal. Se calculan las energías de los estados 1s y 2s como función de la geometría del anillo y la posición impureza, para ello se utiliza el método variacional y la aproximación de masa efectiva. Además, se presenta la absorción óptica asociada con las transiciones entre el estado fundamental y el primer estado excitado como función de las energías de fotones incidentes y para diferentes valores de posición de la impureza. Los resultados muestran que la energía de enlace es una función creciente/decreciente del radio interior/exterior. En el caso de los coeficientes de absorción los resultados muestran que los picos máximos tienen corrimientos hacia el "azul" y/o al "rojo", esto obedece a la geometría del anillo cuántico y la posición de la impureza.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 06

**Absorción óptica no lineal y variación del índice de refracción asociadas a estados excitónicos 1s en pozos cuánticos dobles asimétricos de GaAs**

Guillermo L. Miranda<sup>1,3</sup>, M. E. Mora-Ramos<sup>1,2</sup>, C. A. Duque<sup>3</sup>

1 Escuela de Ingeniería de Antioquia, A.A 7516 Medellín, Colombia.

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

3 Instituto de Física, Universidad de Antioquia, A.A.1226, Medellín, Colombia.

Se calculan los estados de tipo 1s para los excitones en pozos cuánticos dobles con confinamiento asimétrico basados en Arseniuro de Galio. Con el espectro de niveles así obtenido se evalúan los coeficientes de absorción óptica lineal y no lineal, así como los cambios relativos en el índice de refracción en primero y tercer órdenes, dentro de la teoría de matriz densidad para la respuesta de polarización eléctrica del sistema. Tanto los estados como los coeficientes ópticos se estudian como funciones de las distintas dimensiones características del pozo doble, como son el ancho de la barrera separadora y de uno de los pozos cuánticos acoplados. También se incluyen los efectos de la aplicación de un campo eléctrico estático orientado en la dirección de crecimiento de la heteroestructura. En dependencia de la geometría específica y de la intensidad del campo aplicado se obtiene que los picos de resonancia de los coeficientes ópticos pueden experimentar corrimientos hacia el rojo o el azul, en tanto que sus amplitudes estarán determinadas por las dependencias funcionales de los elementos de matriz del momento dipolar eléctrico con respecto a esos mismos parámetros.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 07

**Modos ópticos en nanohilos semiconductores revestidos Ge/Si y Si/Ge**

Darío G. Santiago-Pérez<sup>a</sup>, Rolando Pérez-Álvarez<sup>b</sup> y Carlos Trallero-Giner<sup>c</sup>

a Universidad de Sancti Spiritus “José Martí Pérez”

b Universidad Autónoma del Estado de Morelos

c Universidad de La Habana

Se aplica un modelo fenomenológico continuo al estudio de los modos ópticos en un nanohilo revestido, de sección transversal circular. En el límite de onda larga se hace un análisis detallado de los modos ópticos enfatizándose en la determinación de las relaciones de dispersión. En particular se muestra como depende la frecuencia de los modos, de las dimensiones del sistema, las condiciones de empalme y los efectos del esfuerzo que surge en la interfase. Se reportan cálculos en nanohilos de Ge revestido en Si y de Si revestido en Ge.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 08

**Propagación de fonones no-polares en nanohilos semiconductores**

Darío G. Santiago-Pérez<sup>a</sup>, Diosdado Villegas Villegas<sup>b</sup> y Rolando Pérez-Álvarez<sup>c</sup>.

a Universidad de Sancti Spiritus “José Martí Pérez”

b Universidad Central “Martha Abreu” de Las Villas

c Universidad Autónoma del Estado de Morelos.

Utilizando el modelo fenomenológico continuo de onda larga para estudiar el tunelaje de fonones a través de un punto cuántico cilíndrico empotrado en un nanohilo. Particularmente nos enfocamos en los modos de simetría acimutal, para los cuales determinamos los coeficientes de transmisión y reflexión y los tiempos de fase y estancia tanto para los modos desacoplados como para los acoplados. Se reportan cálculos en un punto cuántico de Si empotrado en un nanohilo de Ge y se analiza el efecto del confinamiento longitudinal y radial.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**

POSTER 09

**Generalized Snell's Law and the Optical Absorption**

M. de J. Luévano-Robledo and D. A. Contreras-Solorio

Unidad Académica de Física, UAZ, Calzada Solidaridad S/N, C.P. 98000, Zacatecas, Zac.

This work deals with the question of absorption of electromagnetic waves in matter. When there is no absorption, the approach for electromagnetic waves incident on matter is straightforward using the usual Snell's Law. For absorbent materials the treatment is relatively simple in the case of normal incidence, using a complex refractive index where the imaginary part, known as the extinction coefficient, represents the absorption of the material. However, for the case of oblique incidence of the waves, the approach is complicated because now the so called Generalized Snell's Law is used, where due to the complex refractive index, the angle of refraction is also complex. Consequently, the theory is much more difficult. We explain how a new refractive index, a new extinction coefficient and a new angle of refraction for plane waves of constant phase and inhomogeneous amplitude are redefined. These three properties depend in a complicated way on the angle of incidence. Properties like transmittance, reflectance and absorption are calculated for a layer of metamaterial and for a layer of normal materials. For the case of a metamaterial, calculations are made for a composite made of MgB<sub>2</sub> and SiC for which the refractive index is negative in the wavelength interval from 360 to 414 nm [1,2]. It is found that for the frequency  $f = 393.5$  nm both TE and TM polarizations have the same transmission curve in whole the interval of angle of incidence, from 0° to 90°. For normal materials calculations are made for silicon, aluminum and silver for several wavelengths and both polarizations. Besides calculating transmittance, reflectance and absorption, it is calculated the dependence with the angle of incidence of the new redefined refractive index and extinction coefficient, as well as the angle of refraction of the inhomogeneous plane waves. Additionally, the skin depth is calculated for these materials. The calculations are made using the transfer matrix formalism, with matrices D of scattering and P of propagation.

- 1- A. Semichaevsky et al. Physical Review B76(19), 195123 (2007)
- 2- K. Higginson et al. Appl. Phys. Lett. 95(2), 023306 (2009)

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 10

**Acoustic Transmittance of a Layered System with Lorentzian Distribution of Impedances**

\*J. J. Rodríguez-Pérez, \*\*R. A. Reyes-Villagrana and \*D. A. Contreras-Solorio

\*Unidad Académica de Física, UAZ, Calzada Solidaridad S/N, C.P. 98000, Zacatecas, Zac

\*\*CINVESTAV-Querétaro, Libramiento Norponiente 2000, Fracc. Real de Juriquilla. C.P. 76230. Querétaro, Qro.

We study theoretically the acoustic transmittance of a layered system where the characteristic impedance of the layers with odd numbering is modulated by a Lorentzian function. The impedance of the inserted layers with even number is the same as that of the incident medium which is water. The layer with the highest impedance value is at the center of the structure and the layers with the lowest impedances are at the ends. The thicknesses of the layers are constant but the thickness of the water layers is in general different from that of the layers with variable impedance. The transmittance spectrum presents relatively plane passbands separated by stopbands. The idea of studying this type of system is that a gradually varying impedance for the layers, can improve the transmission of the structure. These systems can have applications in the design of acoustic filters. We compare the transmission of this structure with that produced by a system where all the layers with odd numbering have the same value of impedances. For the calculations we use the formalism of transfer matrix with scattering matrices  $D$  for the interfaces and propagation matrices  $P$  inside the layers.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 11

**Formas funcionales del potencial y la densidad electrónica para grafeno delta dopado.**

Francisco J. López-Rodríguez y Luis M. Gaggero-Sager

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

Establecemos las bases para el estudio del efecto de una línea extendida de defectos sobre una placa de grafeno. Mediante el uso de análisis dimensional y la propuesta de una ecuación de Poisson y la teoría de Thomas-Fermi ambas en el caso bidimensional, obtenemos las formas funcionales del potencial y la densidad electrónica de este problema. Con estos resultados puede ampliarse el estudio al cálculo de la conductividad de este sistema.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS**  
**ENERO 7-10, 2013**

POSTER 12

**Propiedades ópticas lineales y no lineales en un pozo delta-dopado doble asimétrico sometido a campo eléctrico considerando efectos de canje y correlación**

K. A. Rodríguez-Magdaleno, J. G. Rojas-Briseño, J. C. Martínez-Orozco. Unidad Académica de Física,  
Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina con Paseo la Bufa S/N, CP. 98060,  
Zacatecas, Zac. México.

karelyrod@fisica.uaz.edu.mx

Desde su propuesta en 1980 por Wood et al. [1], los pozos delta-dopados son sistemas de confinamiento cuántico que han atraído mucho la atención por las propiedades electrónicas que poseen; como la alta concentración de carga y el confinamiento cuántico de los portadores de carga. Estos sistemas consisten en la incorporación de una gran cantidad de impurezas, donoras (tipo n) o aceptoras (tipo p), en una sola capa de algún material semiconductor. Se aplica un modelo de potencial autoconsistente analítico para estudiar este tipo de sistemas, este modelo fue propuesto por Ioratti en 1990 [2]. Los modelos usados para el cálculo de las propiedades ópticas lineales y no lineales están basados en el formalismo de la matriz densidad [3, 4]. En este trabajo calculamos el estado base y los primeros estados excitados de un electrón confinado en un pozo delta-dopado doble asimétrico en una matriz de Arseniuro de Galio (GaAs) considerando los efectos de canje y correlación, sometiéndolo a campo eléctrico en el rango de -10 a 10 kV/cm. Se obtienen las propiedades ópticas lineales y no lineales relacionadas con la transición intersubbanda principal como función del campo eléctrico. En particular reportamos el coeficiente de absorción y el cambio relativo en el índice de refracción. Los resultados muestran que la asimetría inducida en el sistema delta-dopado doble y la aplicación de campo eléctrico, modifica el comportamiento de la intensidad de los picos de resonancia, así como su ubicación en el eje energético.

[1] C. E. C. Wood, G. Metzger, J. Berry and L. M. Eastman. *J. Appl. Phys.* 51(1), 383 (1980).

[2] L. Ioratti. *Phys. Rev. B.* 41, 8340 (1990).

[3] E. Rosencher, and Ph. Bois. *Phys. Rev. B.* 44, 11315 (1991).

[4] D. Ahn and S.-. Chuang. *J. Quantum Electron.* 23, 2196 (1987).

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 13

**Coefficiente de absorción óptica lineal y su corrección de tercer orden en un pozo  $\delta$ -dopado doble asimétrico con barrera de Schottky en GaAs.**

J.G. Rojas-Briseño, K.A. Rodríguez-Magdaleno, J.C. Martínez-Orozco

Unidad Académica de Física, UAZ. Calzada Solidaridad Esquina con Paseo la Bufa S/N. C.P. 98060,  
Zacatecas, Zacatecas. México.

Hoy en día, debido a las técnicas de crecimiento tan sofisticadas como lo es la epitaxia de haces moleculares (MBE) podemos crecer con relativa facilidad cualquier tipo de sistemas cuánticos semiconductores. Los pozos  $\delta$ -dopados desde que fueron propuestos por Wood et al. [1] causaron gran interés por sus características, como la gran cantidad de portadores de carga que poseen. De manera inmediata se busco alguna aplicación, en particular en los transistores efecto de campo [2]. En este trabajo presentamos el cálculo del coeficiente de absorción óptica lineal y su respectiva corrección de tercer orden de un pozo  $\delta$ -dopado doble (DDQW) con una barrera de Schottky (SB) en su vecindad. Los resultados son reportados con dependencia de la profundidad del segundo pozo, del campo elctrico aplicado y además se considera canje y correlacion. Nuestros calculos muestran que conforme aumentamos la densidad bidimensional del segundo pozo hay un corrimiento hacia el rojo, mientras que cuando se incrementa el campo elctrico existe un desplazamiento hacia el azul. Estos resultados son de gran importancia debido a su posible aplicacion en dispositivos optoelectronicos [3] tales como fotodetectores intersubbanda en el rango del infrarrojo lejano.

[1] Schubert, Erdmann F.; Fischer, A.; Ploog, Klaus, IEEE Trans., ED-33 (1986) 625.

[2] C. E. C. Wood, G. Metze, J. Berry, and L. F. Eastman, J. Appl. Phys.,51 (1980) 383.

[3] Doyeol Ahn & Shun-lien Chuang, IEEE Journal of Quantum Electronics, QE-23 (1987) 2196.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 14

**Modelos de protofibrillas de amiloidosis de cadena ligera.**

Jessica Araujo Rangel, Diana Valenzo Macías y Nina Pastor Colón

Facultad de Ciencias, UAEM. Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos

nina@uaem.mx

Las amiloidosis son un conjunto de enfermedades caracterizadas por el depósito de fibras amiloides en diferentes órganos y tejidos del cuerpo, debido al plegamiento anómalo de proteínas. La amiloidosis de cadena ligera (AL) es el tipo de amiloidosis más prevalente en países occidentales; es una enfermedad sistémica en la cual las células B producen grandes cantidades de cadenas ligeras, que se depositan en riñón y corazón principalmente [1].

Se desconocen los intermediarios involucrados en el proceso de formación de fibras en AL; sin embargo se sabe que la inestabilidad termodinámica y la capacidad intrínseca de la secuencia son factores que favorecen este proceso [2]. No se han reportado estructuras atómicas de fibras amiloides para la región variable de las cadenas ligeras, por lo que proponemos generar in silico cinco posibles módulos precursores, y las protofibrillas que resultan de su agregación, para cuatro proteínas  $\lambda 6a$  con diferente potencial fibrilogénico. Estos módulos van perdiendo mecanismos de antiagregación presentes en estos dominios, que evitan la interacción borde-borde de las proteínas [3]. Dos de estas proteínas, 6aJL2 y R24G, son las variantes alotípicas más comunes para línea germinal [4], y las otras dos, JTO y WIL, corresponden a las cadenas ligeras aisladas de un paciente con mieloma múltiple y un paciente con AL, respectivamente [5]. Planteamos como hipótesis que las diferencias en la eficiencia para formar fibras de 6aJL2, R25G, WIL y JTO se pueden explicar en términos de las características fisicoquímicas de los módulos capaces de asociarse para formar protofibrillas, y de la estabilidad relativa de las protofibrillas.

Los módulos se sometieron a dos rondas de acomplamiento molecular para generar homotetrámeros de cada uno de ellos, con el servidor ClusPro 2.0 (<http://cluspro.bu.edu/>),. Identificamos visualmente aquellos homotetrámeros que eran extensibles como fibras amiloides, y los clasificamos de acuerdo a su topología. Los modelos seleccionados pasaron por un proceso de refinamiento estructural mediante su relajación con once ns de dinámica molecular bajo condiciones fisiológicas (pH=7; 0.1M KCl; 298K) con el programa NAMD (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/namd/>). Calculamos la energía de los modelos con CHARMM (<http://www.charmm.org/>) para obtener la energía de amarre de cada modelo de protofibrilla y la energía de interacción en cada interfaz de los tetrámeros, y el potencial electrostático de los modelos de protofibrillas con el programa APBS ([www.poissonboltzmann.org/](http://www.poissonboltzmann.org/)), utilizando como solvente agua sin iones para resaltar al máximo las interacciones electrostáticas de los modelos generados. Los modelos representativos de cada fragmento se obtuvieron promediando las estructuras de los intervalos más estables durante la simulación.

Encontramos una correlación entre la cantidad de fibras generada experimentalmente y la cantidad de isómeros viables para cada proteína. Para algunos de los isómeros, las proteínas más amiloidogénicas hacen variantes más estables de la protofibrilla.

[1] Dispenzieri Blood Rev., 26:137. 2012;

[2] Eichner, et al. Molecular Cell, 43, 8. 2011;

[3] Richardson & Richardson PNAS, 99, 2754. 2002;

[4] Del Pozo, et al. Proteins 72, 684. 2008; [5] Wall, et al. Biochemistry, 38, 14101. 1999.

Agradecemos el tiempo de cómputo en Kan Balam (UNAM).

Financiamiento: CONACyT 133294.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 15

**Zonas clave para la formación de fibras amiloides en dominios variables de cadena ligera de inmunoglobulinas humanas.**

Liliana Martínez Ávila, Jessica Araujo Rangel, Diana Valenzo Macías y Nina Pastor Colón

Facultad de Ciencias, UAEM Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos  
nina@uaem.mx

La amiloidosis de cadena ligera (AL) es una enfermedad caracterizada por la deposición de fibras amiloides compuestas principalmente del dominio variable de las cadenas ligeras de anticuerpos, causando la disfunción del órgano en el que se depositan [1]. Hay dos tipos de cadenas ligeras en humanos, las  $\lambda$  y las  $\kappa$ . En individuos sanos, prevalecen las tipo  $\lambda$ , mientras que en pacientes con AL, las cadenas  $\kappa$  son las más comunes. Cada paciente de AL presenta una secuencia de aminoácidos única, ya que las fibras contienen fragmentos de anticuerpos maduros. Existen 40 subclases de cadenas  $\kappa$ ; de éstas, once se han encontrado en pacientes con AL, y la subclase  $\kappa$ 1 O18/O8 es la más común en la clínica [2]. De las 31 subclases de cadenas  $\lambda$  existentes, veinte se han encontrado en pacientes con AL, siendo la subclase  $\lambda$ 6a la más común en la clínica [2]. Se conocen las secuencias de aminoácidos para proteínas tipo  $\lambda$  y  $\kappa$  tanto de línea germinal [3], como aisladas de pacientes con AL y de individuos sin AL [2]. Nos interesa determinar qué tanto del potencial pro-fibra de cada línea germinal persiste en las cadenas ya maduras.

Para determinar las regiones pro-fibra de este set de secuencias utilizamos el servidor ZipperDB [4], el cual construye modelos de fibras amiloides formadas por secciones de seis aminoácidos contiguos usando un templado de fibra amiloide. Dividimos a las líneas germinales en dos grupos: aquellas con pacientes reportados y aquellas sin pacientes reportados. Comparamos las regiones pro-fibra para cada grupo de línea germinal, así como para cada subclase de cadena  $\lambda$  y de cadena  $\kappa$ , tanto de pacientes como de controles.

A nivel de línea germinal observamos que la clase  $\lambda$  presenta más regiones pro-fibra que la  $\kappa$ , y además, están en regiones diferentes del dominio. Esto coincide con la prevalencia de las  $\lambda$  sobre las  $\kappa$  en la clínica. En la clase  $\lambda$  encontramos que la hebra F presenta una alta tendencia de formación de fibra, tanto en línea germinal como en anticuerpos ya maduros de las cinco subclases analizadas. Con respecto a la clase  $\kappa$ , encontramos que las hebras B y E, y las asas B-C y D-E presentan una alta tendencia de formación de fibras, tanto en línea germinal como en anticuerpos maduros de las nueve subclases analizadas. Notamos que el proceso de maduración provoca la adquisición o la pérdida de regiones pro-fibra. Por tanto podemos concluir que el potencial para formar fibras de los anticuerpos maduros es una combinación de las propiedades de la línea germinal y de los efectos de las mutaciones adquiridas durante la maduración.

[1] Dispenzieri Blood Rev., 26:137. 2012

[2] ALBase <http://albase.bumc.bu.edu/aldb/> Bodi K et al. (2009) Amyloid 16:1; Poshusta TL et al. (2009) PLoS ONE 4:e5169; Bellavia D et al. (2011) J. Am. Soc. Echocardiogr. 24:444

[3] VBASE <http://vbase.mrc-cpe.cam.ac.uk/>

[4] ZipperDB <http://services.mbi.ucla.edu/zipperdb/> Goldschmidt L et al. PNAS USA 107:3487 (2010)  
Financiamiento: CONACyT 133294

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 16

**Optical Properties of Composite Multilayered Photonic Structures: the addition of functions.**

Anupam Mukerjee<sup>1</sup>, A. David Ariza-Flores<sup>1,2</sup> and Vivechana Agarwal<sup>1</sup>

<sup>1</sup>CIICAp, UAEM, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa Cuernavaca Morelos 62210, México.

<sup>2</sup>Department of Physics, Facultad de Ciencias, UAEM, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa Cuernavaca  
Morelos 62210, México.

E-mail: david1cool@gmail.com

We discuss addition of functions technique in multilayered photonic structures, to create complex structures consisting of several photonic crystals. We compare the optical reflectivity response of both the composite structures obtained numerically from our addition method and the sequential stacking (previously reported). The results showed a similar reflectivity spectrum for the two adding methods. The former procedure gives substantial advantage over the later due to the reduced physical size of the final composite photonic crystal. The addition procedure can be applied to a wide range of optical filters. We have also demonstrated the addition of functions experimentally by adding two Fibonacci structures with microcavities.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 17

**Ondas interfaciales de cizalladura horizontal en un bi-material piezoeléctrico-piezomagnético.**

José A. Otero Hernandez<sup>1</sup>, Reinaldo Rodríguez Ramos<sup>2</sup> y Guillermo Monsiváis Galindo<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> Instituto de Cibernética, Matemática y Física, La Habana, Cuba.

<sup>2</sup> Facultad de Matemática y Computación, Universidad de la Habana, Cuba.

<sup>3</sup> Instituto de Física, Universidad Autónoma de México, México.

En este trabajo se presenta un modelo para estudiar la propagación de las ondas interfaciales en un bi-material piezoeléctrico-piezomagnético en presencia de contacto imperfecto elástico, eléctrico y magnético. Las relaciones de dispersión son mostradas explícitamente y un conjunto de casos límite son estudiados. Se presentan las condiciones para que exista la onda interfacial y algunos resultados numéricos que demuestran la influencia de la imperfección en las curvas de dispersión.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 18

**Propiedades efectivas en nanocompuestos formados por fibras nanotubos de carbono.**

José Antonio Otero Hernández<sup>1</sup>, Hans Hernández Cabanas<sup>1</sup>, Rolando Perez Álvarez<sup>2</sup>, Reinaldo Rodriguez Ramos<sup>3</sup> y Guillermo Monsivais Galindo<sup>4</sup>.

<sup>1</sup> Instituto de Cibernética, Matemática y Física, La Habana, Cuba.

<sup>2</sup> Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, México.

<sup>3</sup> Facultad de Matemática y Computación, Universidad de la Habana, Cuba.

<sup>4</sup> Instituto de Física, Universidad Autónoma de México, México.

En este trabajo se calculan las propiedades efectivas de un compuesto formado por fibras de nanotubos de carbono distribuidas periódicamente dentro de una matriz polimérica. Para obtener los resultados se combina el Método de Homogeneización Asintótica y el Método de Elemento Finito.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 19

**Estudio de la flexión en multicapas piezoeléctricas.**

Calixto González Zamora<sup>1</sup>, Ángel Valledor Ros<sup>1</sup> y José Antonio Otero Hernández<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Centro de Investigaciones Navales, La Habana, Cuba.

<sup>2</sup> Instituto de Cibernética, Matemática y Física, La Habana, Cuba.

Se presenta un modelo de Elemento Finito para estudiar la flexión en multicapas piezoeléctricas. Se muestran dos tipos de análisis: modal y armónico. En el análisis modal se exhiben las 10 primeras frecuencias de resonancias (autovalores) y la distribución de desplazamientos (autovectores), mientras que en el análisis armónico se presenta la respuesta eléctrica del sistema (impedancia eléctrica) como consecuencia de una excitación eléctrica.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 20

**Propiedades efectivas en materiales compuestos fibrosos en presencia de contacto imperfecto elásticos.**

José A. Otero Hernandez<sup>1</sup>, Reinaldo Rodríguez Ramos<sup>2</sup> y Guillermo Monsiváis Galindo<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Cibernética, Matemática y Física, La Habana, Cuba.

<sup>2</sup> Facultad de Matemática y Computación, Universidad de la Habana, Cuba.

<sup>3</sup> Instituto de Física, Universidad Autónoma de México, México.

Se presenta un modelo semi-analítico para obtener las propiedades efectivas en compuestos elásticos formados por fibras. Para estudiar la imperfección en las intercaras se considera un modelo de “resorte”, el cual está caracterizado por tres constantes de imperfección variables en las intercaras. Se presentan los resultados numéricos para los siguientes casos de constantes de imperfección: 1) inversamente proporcional a radio de las fibras, 2) inversamente proporcional a radio de las fibras y variación línea con respecto al ángulo, 3) inversamente proporcional a radio de las fibras y variación cuadrática con respecto al ángulo y 4) inversamente proporcional a radio de las fibras y variación cúbica con respecto al ángulo.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 21

**Electrón confinado en un pozo parabólico triple con masa efectiva dependiente de su posición, en presencia de un campo eléctrico**

Ri. Betancourt R. <sup>(1)</sup> Martín Eduardo Molinar T. <sup>(2)</sup>, Re. Betancourt Riera <sup>(1)</sup>, Carlos Figueroa N. <sup>(3)</sup>

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

*(2) Comisión Nacional del Agua, Cultura y Comonfort, Edif. México, 3er Piso, Col. Villa de Seris, C.P. 83280, Hermosillo, Sonora, México.*

*(3) Universidad de Sonora. Departamento de Ingeniería Industrial. Rosales y Luis Encinas C.P. 83000. Hermosillo, Sonora, México.*

Con el desarrollo de las técnicas de crecimiento de sistemas nanoestructurados, en los últimos años se ha estimulado el estudio sistemas con masa dependiente de la posición, debido a que permiten una mejor descripción de los procesos físicos, como los observados en cristales de composición granulada, puntos cuánticos, clúster de  $^3\text{He}$  y clúster metálicos [1]. La masa efectiva dependiente de la posición es también utilizada en la construcción de pseudopotenciales [2].

El modelo de la Masa Efectiva ha demostrado una gran eficacia a la hora de estudiar el movimiento de los electrones en sistemas periódicos y cuasiperiodicos, en particular en aquellos sistemas semiconductores con heterouniones abruptas. En estos materiales mesoscopicos, la masa efectiva de los portadores de carga dependen de la posición [1]. En consecuencia el estudio de la ecuación de Schrödinger con masa efectiva dependiente de la posición nos permite una mejor comprensión de los efectos cuánticos observados en estas nanoestructuras.

En este trabajo estudiaremos el comportamiento de un electrón con masa efectiva dependiente de su posición, confinado en una matriz de  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ , en presencia de un campo eléctrico externo. Asumiremos una dependencia lineal entre la concentración,  $x$  y la variación masa efectiva respecto a la dirección de crecimiento. Usando como base de las funciones de un electrón confinado en un pozo de potencial infinito, se resuelve numéricamente la ecuación de Schrödinger con masa efectiva variable, considerando una estructura de tres pozos de potencial parabólico. El operador de energía cinética con masa dependiente de la posición se escribe de tal forma que se asegura la hermiticidad del mismo. Como resultado de nuestro trabajo, se determinó las energías y la densidad de probabilidad para el caso en que los tres pozos son simétricos, asimétricos y por ultimo, el caso donde los pozos de los extremos son iguales y el pozo central es diferente. Se interpretan los resultados en cada caso.

#### Bibliografía

1. arXiv:0910.1209v1[quant-ph] 7 Oct 2009.
2. G.B.Bachelet , D.M. Ceperley and M.G.B.Chiochetti, Phys.Rev.Lett. 62 (1989) 2088.
3. Martín E. Molinar-Tabares and Germán Campoy-Güereña, J. Compt. Theor. Nanosci., Vol. 7, No. 11, 2308-2313.
- 4.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 22

**Analysis of the transmission and transport properties through no-massive and massive Cantor quasi-regular multilayer systems based on single-layer graphene**

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

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

In the last years the quasi-regular systems based on graphene have been studied due to their particular properties (self-similarity, fractality and criticality) and their possible applications in the field of technology [1-3]. In the present work, we use the standard transfer matrix method to study theoretically the transmission and transport properties of multilayer graphene systems arranged according to the generations rules of the Cantor set. We deal with two different structures: the massive and no-massive systems. The massive system is generated by considering a single-layer of graphene on alternating substrates, such as Silicon Carbide (SiC) and Silicon Oxide (SiO<sub>2</sub>), which are capable of breaking and no-breaking the symmetry of graphene. On the other hand, the no-massive system is built by considering electrostatic probes that act perpendicularly to the graphene sheet. The aim of this work is to compare the peculiarities of both systems and find out if the well-known self-similar characteristics of the Cantor set also manifest in this type of system, both in the transmission spectra and the linear-regime conductance.

1. E. Maciá, *Rep. Prog. Phys.* **69**, 397 (2006).
2. L. Sun, C. Fang, Y. Song, and Y. Guo, *J. Phys.: Condens. Matter* **22**, 445303 (2010).
3. P. Zhao and X. Chen, *Appl. Phys. Lett.* **99**, 182108 (2011).

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 23

**Determinación del flujo de calor conductivo en sistemas geotérmicos Aplicando simulación Monte Carlo  
para la propagación de errores**

A. Bassam<sup>1,\*</sup>, J. A. Hernández<sup>1</sup>, J.A. Andaverde-Arredondo<sup>2</sup> y E. Santoyo<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Universidad 1001, Col. Chamilpa, Cuernavaca, Morelos 62210; <sup>2</sup>Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Veracruzana, Av. Universidad Veracruzana Km. 7.5, Coatzacoalcos, Veracruz, México; <sup>3</sup>Centro de Investigación en Energía, Universidad Nacional Autónoma de México, Priv. Xochicalco s/n, Col. Centro, Temixco, Morelos 62580, México; Autor responsable: [alibassam@uaem.mx](mailto:alibassam@uaem.mx)

La determinación de los flujos de calor de sistemas geotérmicos “hidrotermales” es una de las tareas primordiales usadas para la estimación de sus reservas energéticas, y con grandes posibilidades de aplicación para el estudio de los nuevos sistemas geotérmicos mejorados y promisorios de “roca seca caliente”.

En el presente trabajo se propone una nueva metodología para determinar los flujos de calor conductivos con base en la teoría de conducción de calor multi-capas de la ley de Fourier y el estudio geoquimiométrico de propagación de errores usando la simulación numérica de Monte Carlo. La metodología desarrollada fue exitosamente validada con datos experimentales de flujo de calor reportados en la literatura, con los cuales mostró una concordancia estadística aceptable al aplicarse pruebas de significancia a un 95 % de nivel de confianza.

El nuevo método fue aplicado a la determinación del flujo de calor en el campo geotérmico de Los Humeros, Puebla. El estudio utilizó mediciones de temperatura de pozos conductivos, así como algunos datos experimentales de conductividad térmica de las rocas dominantes en el campo y las temperaturas estabilizadas de formación (TEF). Estas últimas fueron estimadas con el método de Horner usando métodos de regresión lineal y cuadrática. Se observó que el método de cálculo de las TEF influye en las distribuciones estadísticas obtenidas para las estimaciones de los flujos de calor existentes.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 24

**Análisis de la densidad de iones positivos por medio de la sonda Langmuir en el plasma CO con descarga DC**

R. Díaz<sup>1</sup>, J Rodríguez<sup>1</sup>, FB Yousif<sup>1</sup>, AB Mondragon<sup>1</sup>, B Fuentes<sup>2</sup> y F. Vazquez<sup>2</sup>

1 Facultad de Ciencias-UAEM, Av. Universidad, C.P. 62210, Cuernavaca, Morelos, México.

2 Facultad de Ciencias-UNAM, México, México.

Investigación de la medición de la densidad de iones positivos empleando una descarga en el cátodo hueco en plasmas electronegativos de CO. Los métodos usados son: Movimiento Orbital Limitado (OML), Balance de Corriente (CB) y el método de Potencial Flotante (FP). Todos los métodos mencionados están basados en el aprovechamiento de la corriente de saturación de los iones positivos en las curvas I-V.

Nuestros resultados identifican al método FP como el más adecuado para la evaluación de la densidad de los iones positivos usando el lado positivo de las curvas I-V. La temperatura electrónica fue medida en función de la presión usando el crecimiento exponencial en la corriente electrónica así como también en el método FP tomando la corriente de saturación de los iones positivos en las curvas I-V, ambos resultados fueron compatibles dando crédito al método FP.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 25

**A comparative study of the transmission and transport properties of massive and massless Dirac electrons in periodic potentials: The case of coupled graphene superlattices**

F. Sánchez-Lara, J. Madrigal-Melchor, and I. Rodríguez-Vargas

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

We study the transmission and transport properties of massive and massless Dirac electrons in periodic potentials (Superlattices). Particularly, we have considered periodic potentials created by means breaking-symmetry substrates (massive electrons) and electrostatic potentials (massless electrons), respectively. The transfer matrix approach and the Landauer-Buttiker formalism have been implemented to obtain the transmission probability and the linear-regime conductance for both individual and coupled Superlattices (SLs). We end that the transmission probability as a function of the energy of the incident electrons as well as the angular dependence of thereof can be modulated (Filtered) tailoring the parameters (barrier and well widths, barrier height, energy and angle of the incident electrons) of the individual SLs accordingly. In the case of the linear-regime conductance turns out that the same principle of filtering using for the transmission properties applies. So, the transport properties can be modulated readily choosing appropriately the parameters of the individual SLs. Likewise, the main differences between the propagation and transport properties of massive and massless Dirac electrons in SLs are highlighted.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 26

**The role of propagating and bound states on the conductance oscillations in graphene-based superlattices**

J. A. Briones-Torres, J. Madrigal-Melchor, and I. Rodríguez-Vargas

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

One of the well reported characteristics of graphene-based multiple barrier structures is the oscillatory nature of the conductance [1]. This important characteristic is presented irrespective of the external mechanism used to create the barrier: magnetic fields, electrostatic potentials, strain effects, breaking-symmetry substrates, etc.. However, none of the multiple reports that we can find in the literature explain the origin of the oscillations and even more the role played by Klein tunneling. Following the guide lines of a recent report [2], we show that the oscillations of the conductance for massless (electrostatic barriers) and massive Dirac electrons (breaking-symmetry-substrate barriers) turn out from the opening-closure of energy minibands, contrary to the opening and opening-closure of subbands for a single quantum well [2]. Moreover, we find that in the particular case of massless Dirac electrons the low energy peak presented in the conductance comes from the change in the nature of the energy states from propagating to evanescent states, which can be readily seen in the energy-wavevector contour plots of the transmission probability.

1. A. F. Young and P. Kim, Nat. Phys. 5, 222 (2009).
2. I. Rodríguez-Vargas, J. Madrigal-Melchor and O. Oubram, J. Appl. Phys. 112, 073711 (2012).

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 27

**The hydrostatic pressure effects on intersubband optical absorption of delta- MIGFET in GaAs**

O. Oubram<sup>1</sup>, O. Navarro<sup>2</sup>, L. M. Gaggero-Sager<sup>3</sup>

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

<sup>2</sup> Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 70-360, México D.F 04510, México

<sup>3</sup>Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

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

The effects of hydrostatic pressure on subband structure and optical transitions in GaAs delta- Multiple Independent Gate Field Effect Transistor (delta-MIGFET) are theoretically studied. The electronic structure of delta-MIGFET under the hydrostatic pressure is determined by solving the Schrodinger equation and a simple algebraic method. From calculations, it is found that the subband energies and intersubband optical absorption are quite sensitive to the applied hydrostatic pressure and voltage contact. Our results show that the pressure and voltage contact play an important role in the optical absorption coefficients in a delta-MIGFET.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 28

**Refractive index changes in delta-MIGFET GaAs under effect of hydrostatic pressure**

O. Oubram<sup>1</sup>, I. Cisneros-Villalobos<sup>1</sup>

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

Email: [oubram@uaem.mx](mailto:oubram@uaem.mx), [luis.cisneros@uaem.mx](mailto:luis.cisneros@uaem.mx)

The effect of hydrostatic pressure on the refractive index changes (RIC) is studied in delta-Multiple Independent Gate Field Effect Transistor (delta-MIGFET) in GaAs. We use algebraic formalism to calculate the electronic structure and the RIC. Our results show that the position and the magnitude of the linear, nonlinear and total RIC are sensitive to hydrostatic pressure, voltage contact and bidimensional density. The incident optical intensity has a great effect on these optical quantities.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 29

**The electric field effects on intersubband optical absorption of GaAs delta-MIGFET transistor**

O. Oubram<sup>1</sup>, I. Cisneros-Villalobos<sup>1</sup>

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

Email: [oubram@uaem.mx](mailto:oubram@uaem.mx), [luis.cisneros@uaem.mx](mailto:luis.cisneros@uaem.mx)

The intersubband optical absorption in GaAs delta-Multiple Independent Gate Field Effect Transistor (delta-MIGFET) is theoretically investigated for different applied electric field. Our results show that the position and the magnitude of the linear, nonlinear and total absorption coefficient are sensitive to electric field and voltage contact. The incident optical intensity has a great effect on these optical quantities.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 30

**Emisión luminiscente de materiales ferroeléctricos libres de plomo KNNLaTi**

M.D. Durruthy-Rodríguez<sup>1</sup>, M. Hernández-García<sup>1</sup>, J. Portelles<sup>1,2</sup>, J. Fuentes<sup>1,2</sup>, A. Pérez<sup>2</sup>, M.A. Landaverde<sup>3</sup>,  
J. M. Yañez-Limón<sup>3</sup>.

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

<sup>2</sup> Facultad de Física, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, Vedado, La Habana, CP 10400, Cuba.

<sup>3</sup> CINVESTAV-Unidad Querétaro, IPN, Libramiento Norponiente 2000, Fracc. Real de Juriquilla, CP 76230, Querétaro, México.

Resultados novedosos de emisión luminiscente de materiales ferroeléctricos libres de plomo son presentados. Cerámicas KNN dopada con La y Ti fueron obtenidas por el método cerámico tradicional sinterizadas a 1100°C y 1190°C y conformadas a 10 y 80 MPa fueron obtenidas. El La<sup>3+</sup> substituye a los iones K<sup>1+</sup> y Na<sup>1+</sup> en el sitio A y el Ti<sup>4+</sup> a los iones Nb<sup>5+</sup> en el sitio de B. Se obtienen cerámicas densas con 94% de la densidad teórica. La Microscopía de Fuerza de Piezorespuesta (PFM) muestra tamaño de granos de 27-28 nanómetros para las cerámicas conformadas a 10 Mpa y granos en forma de agujas para las muestras conformadas a 80 Mpa a ambas temperaturas de sinterización respectivamente. La energía de la banda prohibida está ~3.0 eV, se presenta una fuerte emisión en las zonas del verde-amarillo a 2.18 eV (568 nm) y en el rojo a 1.86 eV (664 nm) medidos a temperatura ambiente.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 31

**Conduction properties of multilayered period-doubling and silver-mean grapheme structures**

G. Rodríguez-Arellano, D. P. Juárez-López, J. Madrigal-Melchor, J. C. Martínez-Orozco and I. Rodríguez-Vargas Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad Esquina con Paseo La Bufa S/N, 98060 Zacatecas, Zac., Mexico. E-mail: [jmadrigal.melchor@fisica.uaz.edu.mx](mailto:jmadrigal.melchor@fisica.uaz.edu.mx)

In this work we alternate breaking-symmetry-substrates (BSS) and non-breaking-symmetry-substrates (NBSS) such as SiC and SiO<sub>2</sub>, following the Silver-Mean (MSMGS) and Period-Doubling (MPDGS) sequences. We implement the Transfer Matrix technique to calculate the transmittance and the linear-regime conductance as a function of the most relevant parameters of the multilayered graphene structures: energy and angle of incidence, widths of BSS and NBSS regions and the generation of the quasi-regular sequence. We analyze the main difference of the transmission and conductance properties between MSMGS and MPDGS.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 32

**Dirac electrons through grapheme multilayers with Gaussian profile**

J. A. Aguilar-Hernández, J. Madrigal-Melchor, and I. Rodríguez-Vargas

Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad Esquina con Paseo La Bufo S/N, 98060 Zacatecas, Zac., México. E-mail: jmadrigal.melchor@fisica.uaz.edu.mx

In this work, we use the T-matrix method to study the tunneling of Dirac electrons through graphene multilayers. A graphene sheet is deposited on top of slabs of SiO<sub>2</sub>-SiC substrates, of which we applied a Gaussian distribution in the size width of SiC substrate. We calculate the transmittance and conductance as a function of energy for different incident angles and different number of layers of the Gaussian distribution. We obtain different stop band regions. These regions are wider when the width of the barrier is increased. Furthermore, it's possible to tune the width and the position of stop-band with the angle of incidence, the  $\sigma$  value of the Gaussian distribution, and the difference between the maximum-minimum sizes of the barrier.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 33

**Perfil de resonancias de ondas SH en laminados elásticos**

J H Cabanas<sup>1,2</sup>, J A Otero<sup>1,2</sup>, G Monsivais<sup>2</sup>

1: Instituto de Cibernética, Matemáticas y Física, Cuba.

2: Instituto de Física, UNAM, México

En un medio laminado se ejerce en el extremo izquierdo del material una tensión periódica en el tiempo, que se propaga por la superficie en una dirección perpendicular a la heterogeneidad, provocando la propagación de ondas SH a lo largo del laminado. Bajo estas condiciones se determina el desplazamiento en el extremo derecho del laminado. Este desplazamiento queda en función de la frecuencia de la tensión externa que se ejerce sobre la cara izquierda del material y del vector de onda con el que se propaga esta tensión en esa cara. Fijando el valor de este vector de onda, el cual por Ley de Snell será continuo en todo el material, se puede obtener el perfil de resonancias para el laminado. El procedimiento se aplica para varios laminados. Primeramente se realiza el caso de láminas aisladas de un material, luego el de láminas acopladas y por último se analiza el caso de un material trifásico del tipo ABA, donde A y B corresponde a los constituyentes o fases del compuesto laminado. En este caso se realiza un análisis de la influencia del grosor de la capa B en el perfil de resonancias.

Palabras clave. Acústica lineal, Vibraciones y ondas mecánicas, Resonancia, amortiguamiento y estabilidad dinámica

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 34

**Curvas de dispersión en guías de ondas de materiales compuestos periódicos mediante el método de  
homogeneización asintótica**

Hans Hernández Cabanas<sup>1,2</sup>, José A. Otero Hernández<sup>1</sup> y R. Pérez Álvarez<sup>2</sup>

1: Instituto de Cibernética, Matemáticas y Física, Cuba.

2: Facultad de Ciencias, UAEM, México

Los materiales compuestos fibrosos tienen gran utilidad en la elaboración de estructuras de gran resistencia y rigidez. Uno de los métodos más empleados en los ensayos no destructivos para inspeccionar estas estructuras es mediante las ondas acústicas, considerando estas estructuras como guías de ondas, lo cual permite inspeccionar largas distancias en poco tiempo y con menos gastos. Es importante poder conocer de antemano cuales son los modos propios de oscilación de la estructura y una de las formas de obtenerlos es mediante las curvas de dispersión del mismo. En este trabajo se obtienen dichas curvas en una guía fibrosa obteniendo previamente los coeficientes efectivos y considerando entonces la guía como homogénea.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 35

**Propiedades globales de compuestos piezoeléctricos periódicos con celdas en forma de paralelogramo y condiciones de contacto imperfecto**

Dr. C. Juan Carlos López Realpozo, Dr. C. Reinaldo Rodríguez Ramos, Dr. C. Raúl Guinovart Díaz, Dr. C. Julián Bravo Castillero.

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

Al elaborar materiales compuestos, se determina entre las fases completamente insolubles del mismo, una llamada zona de contacto que es abordada de diferentes formas en la literatura. Este trabajo se dedica a la determinación de las propiedades efectivas de materiales compuestos piezoeléctricos, con estructuras periódicas, celdas de periodicidad en forma de paralelogramo y asumiendo un tipo determinado de condiciones de contacto imperfecto entre las constituyentes del compuesto. En particular utilizamos el Método de Homogeneización Asintótico (MHA) para obtener los problemas locales, las condiciones de contacto, las ecuaciones homogeneizadas y las expresiones que nos permiten determinar los coeficientes efectivos. Para la realización de este trabajo nos apoyamos en las ecuaciones de Kolosov-Mushelesvili que relacionan los desplazamientos mecánicos con ciertos potenciales que son desarrollados en Series de Laurent o Taylor según sea necesario. Como otros resultados de este trabajo se puede citar la reproducción de resultados obtenidos por otros autores al considerar contacto perfecto y celda de periodicidad cuadrada o hexagonal, así como la determinación de una metodología que puede en general ser usada para resolver problemas de esta índole. También tenemos la implementación numérica en MATLAB que permite el cómputo de los coeficientes efectivos asociados a los problemas locales.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 36

**Forma general de la función de Green regular en el infinito para el operador de Sturm-Liouville matricial**

R. Pernas Salomón y R. Pérez Álvarez

Facultad de Ciencias, UAEM

Mediante el método estándar de transformada de Fourier se analiza la forma de la función de Green regular en el infinito para el operador de Sturm-Liouville matricial. Aparece de manera natural un problema cuadrático de eigenvalores y eigenvectores. La clasificación lograda en años recientes para las soluciones de este último problema permite escribir la función de Green mencionada de una manera general y compacta. Se recuperan casos estudiados anteriormente y se predicen otros casos menos estudiados de diversas excitaciones elementales.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

POSTER 37

**One Phonon Resonant Raman Scattering in Semiconductor Quantum Wires: Magnetic Field Effect**

Ricardo Betancourt Riera(a), René Betancourt Riera(a), Raúl Riera Aroche(b), and José Manuel Nieto Jalil(c)  
Instituto Tecnológico de Hermosillo. Avenida Tecnológico S/N, Col. Sahuaró, C.P. 83170, Hermosillo, Sonora,  
México.

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

Tecnológico de Monterrey-Campus Sonora Norte. Bulevar Enrique Mazón López No. 965, C.P. 83000,  
Hermosillo, Sonora, México.

We have developed a theory of one phonon resonant Raman scattering in a semiconductor quantum wire of cylindrical geometry in the presence of an external magnetic field distribution, parallel to the cylinder axis. The effect of the magnetic field in the electron and hole states, and in the Raman scattering efficiency, is determinate. We consider the electron-phonon interaction using a Fröhlich-type Hamiltonian, deduced for the case of complete confinement phonon modes by F. Comas and his collaborators. We also assume  $T = 0$  K, a single parabolic conduction and valence bands. The spectra are discussed for different magnetic field values and the selection rules for the processes are also studied.

**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS  
ENERO 7-10, 2013**

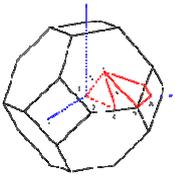
POSTER 38

**Tunelamiento Zener de ondas electromagnéticas en superredes dieléctricas a base de silicio poroso**

J. Octavio Estévez<sup>1</sup>, J. Arriaga<sup>1</sup>, V. Agarwal<sup>2</sup>

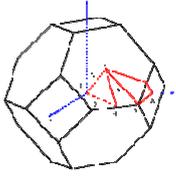
1: Instituto de Física, BUAP

2: CIICaP, UAEM



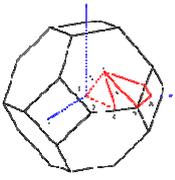
**SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**

**Cuernavaca, 7-10 de enero de 2013**



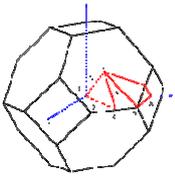
# **SEXTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**

**Cuernavaca, 7-10 de enero de 2013**



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

**Cuernavaca, 7-10 de enero de 2013**



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

**Cuernavaca, 7-10 de enero de 2013**