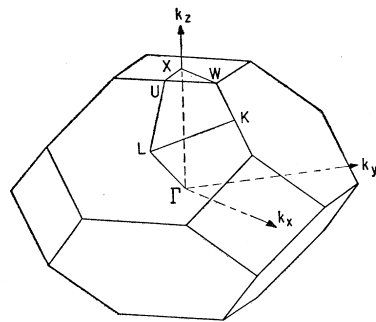




Octavo Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular



2015

Índice

Índice	3
Instituciones organizadoras y patrocinadoras.....	5
Comité Organizador.....	5
Algunos datos de carácter organizativo	5
Programa	7
LUNES 12 de enero. Salón 4. Presiden la sesión: Rolando Pérez Álvarez y Luis Manuel Gaggero Sager	7
MARTES 13 de enero. Salón 4. Presiden la sesión: Miguel Eduardo Mora Ramos y Diego Seuret Jiménez .	8
MIÉRCOLES 14 de enero. Salón 1. Presiden la sesión: Oscar Sotolongo Costa y José Antonio Otero Hernández	9
MIÉRCOLES 14 de enero. Salón 4. Presiden la sesión: Alejandro Ramírez Solís y Claudio Zicovich Wilson	10
TÍTULOS Y RESÚMENES DE LAS CONFERENCIAS	11
TÍTULOS Y RESÚMENES DE LOS CARTELES	37

Instituciones organizadoras y patrocinadoras

1. Red temática de Excitaciones Elementales en Sistemas de Multicapas (PRODEP).
2. Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM)
3. Instituto de Física de la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM)
4. Centro Latinoamericano de Física (CLAF)

Comité Organizador

1. Dr. Rolando Pérez Álvarez (UAEM)
2. Dr. Luis M. Gaggero Sager (UAEM)
3. Dr. Miguel E. Mora Ramos (UAEM)
4. Dr. Alejandro Ramírez Solís (UAEM)
5. Dr. Guillermo Monsiváis Galindo (UNAM)
6. Dr. Juan Carlos Martínez Orozco (UAZ)
7. Ing. Marco A. Huerta Moncada
8. Dr. Oscar Sotolongo Costa (UAEM)
9. Dr. Diego Seuret Jiménez (UAEM)

Algunos datos de carácter organizativo

1. El 8vo Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular tendrá lugar del lunes 12 al miércoles 14 de enero de 2015. Sesionaremos en salones del edificio B de la Facultad de Ciencias de la UAEM.
2. Los organizadores hemos 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.
3. 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.
4. Sugerimos que los autores de carteles los pongan apenas lleguen al Taller; el mismo lunes, de preferencia. De este modo los participantes tendrán más tiempo para verlos.
5. 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 (2015)*”. Estas monografías no tienen que corresponderse necesariamente con los trabajos presentados ni autores participantes en el Taller. Debe entenderse que este es un esfuerzo independiente del Taller. Los autores interesados en que aparezca su trabajo en el Libro que publicaremos posterior al Taller, deben enviarnos el material cuanto antes. Fecha tope: 1 de mayo 2015.
6. Éstas y otras informaciones pueden verse en nuestra página web: <http://web.fc.uaem.mx/~tallerfmcm/>
7. **El programa está muy apretado. Exhortamos a todos los participantes a contribuir al cumplimiento del horario.**

Programa

LUNES 12 de enero. Salón 4. Presiden la sesión: Rolando Pérez Álvarez y Luis Manuel Gaggero Sager

Horario	Título	Autores
10:00-10:30	Efectos de láser intenso sobre pozos cuánticos asimétricos de GaAsAl/GaAl	R. L. Restrepo, E. Kasapoglu, F. Ungan, M. E. Mora-Ramos, A. L. Morales, C. A. Duque
10:30-11:00	Coeficiente de absorción y cambio relativo del índice de refracción para un punto cuántico 2D con perfil de potencial tipo T	J. C. Martínez-Orozco, C. A. Duque. M. E. Mora-Ramos
11:00-11:30	Formulación Lagrangiana y Ecuación Sturm-Liouville matricial: Ecuaciones de Maxwell y propagación de ondas EM en medios anisotrópicos conductores.	R. Pernas-Salomón y R. Pérez-Álvarez
11:30-12:00	Self-similar and zero-k gap properties of aperiodic Cantor graphene structures	R. Rodríguez-González and I. Rodríguez-Vargas
12:00-12:30	RECESO	
12:30-13:00	Variación de la banda prohibida con el ángulo de incidencia en una superred periódica en grafeno	H. García-Cervantes, L. M. Gaggero-Sager, I. Rodríguez-Vargas and G. G. Naumis
13:00-13:30	Los conceptos de autosimilaridad y fractalidad en sistemas ondulatorios	Dan Sidney Díaz Guerrero y Luis Manuel Gaggero Sager
13:30-14:00		

MARTES 13 de enero. Salón 4. Presiden la sesión: Miguel Eduardo Mora Ramos y Diego Seuret Jiménez

Horario	Título	Autores
10:00-10:30	Continuum model for low-frequency phonons of BN nanotubes	Rolando Pérez Álvarez, Leonor Chico Gómez, Carlos Trallero Giner y Dario Santiago Pérez
10:30-11:00	Theory of the tunneling times through a semiconductor heteroestructures with different tunneling channels	Diosdado Villegas, Jesús Arriaga, Fernando de León-Pérez and Rolando Pérez-Álvarez
11:00-11:30	Grafeno, grafito y superconductividad	Rafael Baquero Parra
11:30-12:00	Localization of acoustic modes in periodic porous silicon structures	Z. Lazcano, J. Arriaga and R. Pérez-Álvarez
12:00-12:30	RECESO	
12:30-13:00	Sobre la Teoría de la Elasticidad de Timoshenko	Guillermo Monsiváis Galindo
13:00-13:30	Transmisión y escape en superredes moduladas por una gaussiana	María de la Luz Silba-Vélez, R. Pérez-Álvarez y D. A. Contreras-Solorio
13:30-14:00		

MIÉRCOLES 14 de enero. Salón 1. Presiden la sesión: Oscar Sotolongo Costa y José Antonio Otero Hernández

Horario	Título	Autores
10:00-10:30	<i>Modelado del comportamiento de la superficie y de la cinética de formación de la capa compuesta durante la nitruración por plasma del hierro puro</i>	F. Castillo Aranguren, F. León Cázares, A. Jiménez Cenicerros, J. Oseguera Peña
10:30-11:00	<i>Universalidad de los Números Fractales Críticos en Sistemas Bidimensionales de Electrones con Desorden y Acoplamiento Spin-Órbita Tipo Rashba</i>	E.M. Hernández y J. Sinova
11:00-11:30	Esquema en diferencias finitas para un problema de frontera móvil que modela un proceso de nitruración por plasma	R. D. Santiago-Acosta, J. A. Otero, E. M. Hernández Cooper, R. M. Rosado, A. Jiménez, F. Castillo
11:30-12:00	RECESO	
12:00-12:30	<i>Esquema numérico para un Problema de Stefan: transferencia de calor en una barra unidimensional bifásica</i>	R. Martínez, R.D. Santiago, J.A. Otero, E.M. Hernández, A. Jiménez, F. Castillo
12:30-13:00	<i>Propiedades efectivas en materiales compuestos tridimensionales usando un modelo semi-analítico</i>	J.A. Otero, H. H. Cabanas, Reinaldo Rodríguez, Guillermo Monsivais y Rolando Pérez
13:00-13:30	Explotación del gas de esquisto. Relación con el incremento de La sismicidad	Oscar Sotolongo Costa
13:30-14:00		

MIÉRCOLES 14 de enero. Salón 4. Presiden la sesión: Alejandro Ramírez Solís y Claudio Zicovich Wilson

Horario	Título	Autores
10:00-10:30	Comparación de propiedades energéticas y estructurales del proceso de hidratación de los complejos CH ₃ HgOH y CH ₃ HgCl. Un estudio a nivel DFT	J.I. Amaro Estrada, L. Maron y A. Ramírez Solís
10:30-11:00	Procesos de dispersión y fragmentación en interacciones ion-molécula con acoplamiento electrón-núcleo	Remigio Cabrera
11:00-11:30	Estudios teóricos de las fases ϵ y ζ del oxígeno sólido a altas presiones	A. J. Ochoa-Calle, C. M. Zicovich-Wilson, A. Ramírez Solís
11:30-12:00	Fuerzas de Dispersión de Largo Alcance en el Estudio Teórico-Computacional de Sistemas Cristalinos Microporosos	Erick Iván Román Román
12:00-12:30	RECESO	
12:15-12:45	Obtención de materiales de poro grande a partir de zeolitas naturales	Karell Valdiviés Cruz, Anabel Lam y Claudio M. Zicovich-Wilson
12:45-13:15		
13:15-14:00		

TÍTULOS Y RESÚMENES DE LAS CONFERENCIAS

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
LUNES 12**

CONFERENCIA 01

Efectos de láser intenso sobre pozos cuánticos asimétricos de GaAsAl/GaAs

R. L. Restrepo,^{1,2} E. Kasapoglu,³ F. Ugan,³ M. E. Mora-Ramos⁴, A. L. Morales², C. A. Duque²

Escuela de Ingeniería de Antioquia-EIA, Envigado, Colombia

²Grupo de Materia Condensada-UdeA, Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,
Universidad de Antioquia-UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia

³Department of Physics, Cumhuriyet University, 58140 Sivas, Turkey

⁴Facultad Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México

Este trabajo presenta los resultados teóricos de los efectos de un láser intenso no resonante y de los campos eléctricos y magnéticos sobre las propiedades ópticas lineales y no lineales (el índice de refracción y los coeficientes de absorción) en un pozo cuanto asimétrico de GaAsAl/GaAs. El campo eléctrico y el campo de láser intenso se aplican a lo largo de la dirección de crecimiento del pozo cuántico asimétrico y el campo magnético está orientado perpendicularmente a la heteroestructura. Para calcular la energía y las funciones de onda del electrón en el pozo cuántico asimétrico, se utilizan la aproximación de masa efectiva y el método de función de onda envolvente. El pozo cuántico asimétrico de GaAsAl/GaAs se modela mediante el uso de diferentes concentraciones de aluminio en las barreras a derecha e izquierda. El potencial de confinamiento del pozo cuántico se modifica drásticamente ya sea por el efecto de los campos eléctricos y magnéticos o por la aplicación del láser intenso. Las propiedades ópticas se calculan utilizando el método de la matriz densidad compacta. Los resultados muestran que el efecto del láser intenso compite con los efectos de los campos eléctricos y magnéticos, se observa que la posición de los picos de resonancia de las respuestas ópticas se desplaza hacia bajas energías de los fotones incidentes debido al efecto del láser intenso y que se desplaza hacia energías mayores por los efectos de los campos eléctricos y magnéticos. En general, se encontró que la concentración de aluminio, los efectos de los campos eléctricos y magnéticos y de láser intenso son agentes externos que modifican las transiciones de energía en el pozo cuántico asimétrico, permitiendo modular las respuestas ópticas.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
LUNES 12

CONFERENCIA 02

Coefficiente de absorción y cambio relativo del índice de refracción para un punto cuántico 2D con perfil de potencial tipo T.

J. C. Martínez-Orozco^{1,2}, C. A. Duque², M. E. Mora-Ramos³.

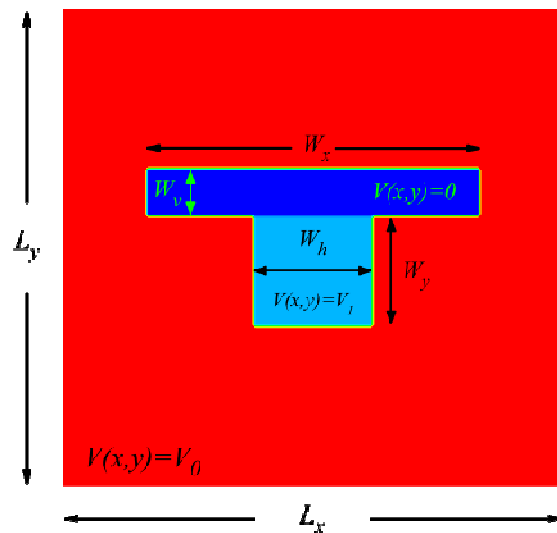
¹Unidad Académica de Física. Universidad Autónoma de Zacatecas. Calzada Solidaridad esquina con Paseo a La Bufa S/N. C.P. 98060, Zacatecas, Zacatecas. México.

²Grupo de Materia Condensada-UdeA, Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia.

³Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av. Universidad 1001, C.P. 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

En este trabajo reportamos el cálculo de la estructura electrónica para un punto cuántico 2D con perfil de potencial tipo T. Este tipo de perfil ha sido crecido mediante los materiales *AlGaAs/GaAs*, *InGaAsN/GaAs* y *GaAsN/GaAs*, solo por mencionar algunos sistemas. En este trabajo, estudiamos teóricamente la estructura electrónica y calculamos los correspondientes elementos de matriz de un sistema *AlGaAs/GaAs* y con ello el coeficiente de absorción y el cambio relativo del índice de refracción. Este sistema, consiste en un punto cuántico 2D en forma de T, el cual está caracterizado por una concentración de Aluminio cero en la región horizontal del potencial (los brazos) y por una concentración de Aluminio x de 0, 0.7, 0.14 y 0.21 en el tallo (la base) del punto cuántico embebido en una región de potencial V_0 que tiene una concentración de Aluminio de $x=0.35$. Reportamos gráficas de contorno de la estructura electrónica, comportamiento de los elementos de matriz para polarizaciones en x y en y , así como las propiedades ópticas antes mencionadas.

Figura: Perfil de potencial del punto cuántico 2D en *AlGaAs/GaAs* embebido en una región de *AlGaAs* con concentración de Aluminio de 0.35. En esta estructura tenemos confinamiento cuántico en la región central del potencial tipo T, el cual se ve modificado por la concentración de aluminio en la región del tallo de potencial de confinamiento.



OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
LUNES 12

CONFERENCIA 03

Formulación Lagrangiana y Ecuación Sturm-Liouville matricial: Ecuaciones de Maxwell y propagación de ondas EM en medios anisotrópicos conductores

R. Pernas-Salomón y R. Pérez-Álvarez

Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, CP

62209, Cuernavaca, Morelos, México

Como caso particular de la densidad Lagrangiana que conduce a la ecuación Sturm-Liouville matricial (ESLM) postulamos una densidad Lagrangiana a partir de la cual podemos obtener las ecuaciones de Maxwell inhomogéneas en presencia de las fuentes del campo electromagnético (EM) para un medio anisotrópico inhomogéneo. Como caso particular de ESLM mostramos una ecuación de movimiento para estudiar la propagación de ondas EM un sistema a capas compuesto de materiales anisotrópicos e inhomogéneos donde se consideran las pérdidas por conductividad. Mostramos que esta ecuación puede ser tratada mediante una matriz de transferencia 4×4 en sistemas a capas anisotrópicos donde los tensores: permitividad, permeabilidad y conductividad eléctrica son constantes por tramos en la dirección perpendicular a las intercaras. Se analiza el caso particular del medio isotrópico como ejemplo ilustrativo.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
LUNES 12

CONFERENCIA 04

Self-similar and zero-k gap properties of aperiodic Cantor graphene structures

R. Rodríguez-González and I. Rodríguez-Vargas

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

We investigate the transmission and transport properties through quasiperiodic or aperiodic structures based on graphene arranged according to the Cantor sequence. In particular, we have found self-similar characteristics in the transmission spectra, so the scalability of them is studied. Specifically, we implement and propose scaling rules for each one of the fundamental parameters (generation number, height of the barriers and length of the system) finding an excellent agreement between the scaled curves and the reference ones. To this regard, it is worth mentioning that the peculiar geometrical characteristics of the fractal sequence are manifested in the physical properties such as the transmittance. Likewise, the zero-k gap properties are investigated, so we can corroborate that this gap is associated with an unusual Dirac point and that it is robust against the generation numbers, width and height of the barriers, and it presents a weak dependence with respect to the incidence angle. Finally, the location of the zero-k gap can be predicted by means of the zero-averaged wave-number.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
LUNES 12**

CONFERENCIA 05

Variación de la banda prohibida con el ángulo de incidencia en una superred periódica en grafeno

H. García-Cervantes¹, L. M. Gaggero-Sager¹, I. Rodríguez-Vargas² and G. G. Naumis³

1 Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos,

Av. Universidad 1001, Col Chamilpa, 62209, Cuernavaca Morelos, México.

2 Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas,

Calzada Solidaridad Esquina Con Paseo La Bufa S/N, 98060 Zacatecas, Zac., México.

3 Instituto de Física, Depto. Física-Química, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Apdo.
Postal 20-364, 01000, México D.F., México.

Se estudia la probabilidad de transmisión en una superred periódica de grafeno variando el ángulo de incidencia. Donde, se construye una superred con un potencial electrostático. Se usa el método de la matriz de transferencia para el cálculo de la transmitancia. Se obtienen tres regiones: en la primera no hay brecha prohibida, en la segunda la relación de la brecha prohibida con el ángulo de incidencia es de forma parabólica y en la tercer región la relación es exponencial. Con lo cual, se puede modular el ancho de la banda prohibida con sólo variar el ángulo de incidencia.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
LUNES 12**

CONFERENCIA 06

Los conceptos de autosimilaridad y fractalidad en sistemas ondulatorios

Díaz Guerrero Dan Sidney, Gaggero Sager Luis Manuel

Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Desde el punto de vista formal (en el sentido matemático), la fractalidad tal como la definió Mandelbrot originalmente, es imposible debido a que debe presentar cierta estructura en cualquier escala. Sin embargo, la autosimilaridad, que es una característica común de cierto tipo de fractales, si es definida hasta un cierto grado es realizable incluso experimentalmente. Así es clara la importancia de estos conceptos en sistemas ondulatorios relacionados a sistemas físicos. En esta charla veremos algunos de los asuntos más relevantes sobre fractalidad y autosimilaridad.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MARTES 13

CONFERENCIA 01

Continuum model for low-frequency phonons of BN nanotubes

Rolando Pérez Álvarez¹, Leonor Chico Gómez², Carlos Trallero Giner³ y Dario Santiago Pérez^{3,4}

1 Universidad Autónoma del Estado de Morelos

2 Instituto de Ciencias de Materiales, Madrid

3 Centro Latinoamericano de Física, Brasil

4 Universidad de Sancti Spiritus, Cuba

Usando un model continuo, calculamos las oscilaciones acústicas de nanotubos de nitruro de boro. Hallamos un excelente acuerdo con cálculos más elaborados. Adicionalmente, encontramos una excelente concordancia de los modos ópticamente activos que da nuestro modelo con aquellos que resultan de cálculos mucho más laboriosos. Verificamos que este modelo describe correctamente la dependencia del modo radial de respiración con el radio del tubo vista experimental y teóricamente, así como la existencia de un modo con ley de dispersión parabólica para bajas frecuencias. Los cruces (anticruces) de modos con diferente (la misma) simetría y otras características de las relaciones de dispersión son igualmente bien descritas.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MARTES 13

CONFERENCIA 02

Theory of the tunneling times through a semiconductor heterostructures with
different tunneling channels

Diosdado Villegas¹, Jesús Arriaga¹, Fernando de León-Pérez² and Rolando Pérez-Álvarez³

¹*Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Apartado Postal J-48, CP 7250 Puebla, México*

²*Centro Universitario de la Defensa de Zaragoza, Ctra. de Huesca s/n, E-50090, Zaragoza, Spain*

³*Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Ave. Universidad 1001, CP 62209, Cuernavacas, México*

A long-wavelength continuum phenomenological model is employed to study phonon tunneling time at oblique incidence on one-semiconductor heterostructure. Analytical expressions for the transmission, reflexion, interference and dwell times are presented. Using the continuity equation for the energy density of the system, a new relation between tunneling times is deduced. As an additional complement, an analysis for the vibrational energy and for the energy density flux of the system is considered. We present numerical results for isotopic Ge superlattices to illustrate the model. Our findings could be easily extrapolated for other system. This study could also be useful for the design of acoustic devices.

References

1. F. de León-Pérez and R. Pérez-Álvarez, Phys. Rev. B **63**, 245304 (2001).
2. F. de León-Pérez and R. Pérez-Álvarez, Phys. Rev. **B 61**, 4820 (2000).
3. C. Trallero-Giner, R. Pérez-Álvarez and F. García-Moliner, Long wave polar modes in semiconductor heterostructures (Pergamon/Elsevier Science, London, (1998).
4. E. H. Hauge, J. P. Falck and T. A. Fjeldly, Phys. Rev. B **36**, 4203 (1987).
5. D. Villegas, F. de León-Pérez and R. Pérez-Álvarez, Phys. Rev. **B 71**, 035322 (2005).
6. E. H. Hauge and J. A. Stovneng, Rev. of Mod. Phys. **61**, 917 (1989).

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MARTES 13

CONFERENCIA 03

Grafeno, grafito y superconductividad.

R. Baquero

Departamento de Física, CINVESTAV

Uno de los materiales que más ha llamado la atención en los últimos años es el grafeno. Uno de los temas de interés es su relación con la superconductividad. El grafeno per se no es superconductor pero al intercalarlo o al depositarle una monocapa si lo es. Sin embargo, las temperaturas críticas obtenidas, hasta el momento, no son muy grandes.

En contraste, ha llamado la atención de manera muy especial el reporte de que grafito tratado en agua presenta Efecto Meissner incluso por encima de la temperatura ambiente. Se trata de unos polvos que levitan en presencia de un campo magnético. Al compactarlos en pastillas pierden la propiedad superconductora, razón por la cual no se les puede medir la resistencia lo cual genera obviamente la duda de si se trata o no de un superconductor.

En la literatura se ha formulado la idea de que es posible que el origen de ese comportamiento este en interfaces cristalinas de tamaño de algunas micras que se forman dentro de los polvos. Hemos explorado esta idea. Encontramos una posible interface que estamos proponiendo. La optimizamos para encontrar las posiciones de los átomos compatibles con el mínimo de energía. Calculamos su estructura electrónica. Obtenemos un resultado interesante que es consistente con un superconductor de alta temperatura crítica. Analizaremos este resultado dentro de esta charla.

Al momento de redactar este resumen, estamos calculando la estructura fonónica con miras a obtener la función de Eliashberg y estudiar el sistema con las ecuaciones de Eliashberg. Reportaremos los avances que tengamos en esta dirección. En nuestro tratamiento incluiremos la variación rápida de la densidad de estados electrónica que no se incluye, por lo general, en los tratamientos presentados en la literatura actualmente. Se suele considerar que la densidad electrónica es constante en un cierto intervalo alrededor del nivel de Fermi, lo cual no es el caso.

La idea final de este trabajo, es poder responder (basados en las hipótesis mencionadas) si el grafito tratado con agua puede ser realmente un sistema superconductor a temperatura ambiente o no, bajo la hipótesis de que el mecanismo es electron-fonon.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MARTES 13

CONFERENCIA 04

Localization of acoustic modes in periodic porous silicon structures

Z. Lazcano^{1,2}, J. Arriaga¹ and R. Pérez-Álvarez²

¹ *Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, Puebla 72570, México*

² *Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 62209, Cuernavaca, México.*

The study of acoustic and elastic wave propagation in phononic crystals (PCs) [1] have been studied theoretically and experimentally [2] in recent years. In analogy with the photonic band gap materials, emphasis in phononic crystals has been on achieving large acoustic band gaps within which propagation of sound is forbidden.

The interest about phononic band gap materials is in both, pure and applied physics. Fundamental physics has a special interest concerned with the localization phenomena of sound and vibrations in PCs. Researchers have prospected numerous applications based on cavity structures built around PCs, such as wave filters, waveguides, and splitters. Furthermore, it is possible to design cavities for coherent (single-wavelength) phonon generation and control, to attain phonon amplification and 'lasing' in the called 'saser', one of the most important potential applications [3].

Periodic solid-state structures exhibit transmission stop bands for waves at certain frequencies. By placing one or more defects into a perfect phononic crystal, acoustic cavities are created inside the system. The presence of these defects, produces localization of elastic or acoustic modes inside the phononic band gap. These localized modes are the acoustic analog of donor or acceptor states produced inside the band gap of semiconductors. In analogy with electronic systems, one can consider these acoustic states to control the sound propagation through the structure.

In 2002, Trigo et al. proposed phonon cavities in structures consisting of two semiconductor superlattices enclosing a spacer layer, showing that acoustical phonons can be confined in such layered structures if the spacer thickness is an integer multiple of the acoustic half-wavelength at the center of one of the superlattice-folded minigaps. These acoustic cavities are semiconductor multilayers in the nanometer scale and are fabricated by molecular beam epitaxy (MBE), which is a sophisticated and expensive technique that requires ultra-high vacuum system and a very tight control on the growth parameters, and modulate the thicknesses is easier than to modulate the elastic properties of the layers. Contrasting, porous silicon (PS) multilayer fabrication is relatively easy and considerably less costly, besides that this material allows to modulate both the thicknesses and the elastic properties of each layer.

By taking advantage of the possibility to modulate the elastic properties of PS layers, and considering that it is possible to create localized modes by introducing a defect layer with different acoustic properties into a periodic structure, in this paper, we investigate the propagation of longitudinal acoustic waves in multilayer structures based on PS, that exhibit resonant cavity modes in frequencies of gigahertz (GHz), consisting of defect layers intentionally introduced in periodic structures. The design and material parameters that allow to create these localized acoustic modes is discussed, and experimental results of the measured acoustic transmission in PS samples fabricated by electrochemical etching are presented.

[1] Kushwaha MS, Halevi P, Dobrzynski L, Djafari-Rouhani B, *Phys Rev Lett* 1993, **71**:2022.

[2] Sánchez-Pérez JV, Caballero D, Martínez-Sala R, Rubio C, Sánchez-Dehesa J, Meseguer F, Llinares J, Gálvez F, *Phys Rev Lett* 1998, **80**:5325.

[3] Fokker PA, Dijkhuis JI, de Wijn HW, *Phys Rev B* 1997, **55**:2925.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MARTES 13**

CONFERENCIA 05

Sobre la teoría de la elasticidad de Timoshenko

Guillermo Monsiváis Galindo

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MARTES 13

CONFERENCIA 06

Transmisión y escape en superredes moduladas por una gaussiana

*María de la Luz Silba-Vélez, *R. Pérez-Álvarez y **D. A. Contreras-Solorio

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

** Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Zacatecas, México.

Estudiamos el coeficiente de transmisión y problema de escape en sistemas en los cuales la altura de las barreras es modulada por una función gaussiana y se compara con sistemas regulares (las alturas tienen la misma altura). Nos basamos en la aproximación de masa efectiva y resolvemos utilizando el formalismo de matrices de transferencia. En sistemas donde la modulación de las alturas es gaussiana por ejemplo para 7 y 9 barreras la transmisión es casi perfecta y las energías de escape $E = E_r + i\Gamma$ se localizan cerca de las bandas de transparencia aunque la coincidencia no es exacta. E_r es la energía del electrón y Γ describe el ancho de los estados. Para estos estados, Γ es muy ancho. En el caso de sistemas regulares solo se presentan picos de resonancia con valor uno y los estados de escape son estrechos. Estudiamos también sistemas de 3 barreras donde las alturas laterales se reducen gradualmente y de donde se aprecia que las resonancias se transforman a bandas de transparencia y la anchura de las energías de escape aumenta. Aunque no hay coincidencia exacta, asociamos el aumento del ancho de las energías de escape con la formación de bandas de transparencia

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 1)

CONFERENCIA 01

Modelado del comportamiento de la superficie y de la cinética de formación de la capa compuesta durante la nitruración por plasma del hierro puro.

F. Castillo Aranguren, F. León Cázares, A. Jiménez Cenicerros, J. Oseguera Peña.
Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey (ITESM), Campus EM. Atizapán de Zaragoza,
E.M. 52926, México.

Diferentes enfoques han sido utilizados para describir el crecimiento de la capa compuesta durante la nitruración gaseosa. En el caso de la nitruración por plasma el proceso es más complejo como resultado del bombardeo de iones, que causa un proceso de erosión superficial. En el trabajo se presenta un modelo matemático que describe la formación de la capa compuesta durante la nitruración por plasma del hierro puro. Este modelo toma en cuenta el efecto de erosión en la interfase plasma-sólido debido a la pulverización. El modelo estudiado representa un problema de difusión con frontera móvil, el cual considera el comportamiento cualitativo del proceso.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 1)

CONFERENCIA 02

Universalidad de los Números Fractales Críticos en Sistemas Bidimensionales de Electrones con Desorden y Acoplamiento Spin-Órbita Tipo Rashba.

E.M. Hernández y J. Sinova

Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey (ITESM), Campus EM. Atizapán de Zaragoza,
E.M. 52926, México.

En este trabajo se presenta un análisis multifractal en sistemas bidimensionales de electrones (2DEG) con desorden. Además, se toma en cuenta el acoplamiento tipo Rashba entre el spin del electrón y su movimiento orbital. Previamente, se ha estudiado la transición de fase aislante-metal-aislante en 2DES con desorden, a través de un análisis de los números fractales críticos. Este tipo de sistemas pertenece a la clase universal de Hamiltonianos de un electrón, observados en el Efecto Hall Cuántico Entero. Con el análisis del espectro multifractal de los estados extendidos, se ha caracterizado la transición de fase en estos sistemas. Aquí se hace un análisis similar de los estados multifractales, tomando en cuenta en el Hamiltoniano de un electrón, el acoplamiento entre el spin y su movimiento orbital. Se puede demostrar que la transición de fase con acoplamiento de spin-órbita tipo Rashba, pertenece a la misma clase universal de 2DES con desorden sin el spin resuelto.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 1)

CONFERENCIA 03

Esquema en diferencias finitas para un problema de frontera móvil que modela un proceso de nitruración por plasma

R. D. Santiago-Acosta, J. A. Otero, E. M. Hernández Cooper, R. M. Rosado, A. Jiménez, F. Castillo.
Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey (ITESM), Campus EM. Atizapán de Zaragoza,
E.M. 52926, México.

Los tratamientos termoquímicos de nitruración en diversas variedades de acero se utilizan ampliamente en la industria debido a que produce importantes mejoras en las propiedades de los materiales. La nitruración se puede realizar con los gases que contienen amoníaco o con sales de cianuro, así como por plasmas débilmente ionizados. El flujo de nitrógeno que penetra por la superficie del material conduce a transformaciones alotrópicas que, en particular, mejora las propiedades mecánicas y químicas del material. La combinación dos capas compactas de nitruros y una zona de difusión de nitrógeno, resulta en el mejoramiento de la resistencia del material al desgaste, por lo cual aumenta significativamente la dureza de la superficie, y en muchos casos en una mejora de la resistencia a la fatiga. En general, la interacción con otras superficies conducen a una disminución de los coeficientes de fricción, así como a una mejor resistencia a la corrosión. El uso del plasma para el tratamiento termoquímico permite que se produzca la difusión a bajas temperaturas en comparación a otros procesos, por lo cual se producen distorsiones muy bajas en las piezas. En este trabajo se propone el uso del método de diferencias finitas para la solución de un modelo matemático de formación y crecimiento de capas durante la nitruración por plasma de hierro puro. Se realizan simulaciones numéricas, las cuales son comparadas con resultados experimentales, otras soluciones analíticas aproximadas.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 1)

CONFERENCIA 04

Esquema numérico para un Problema de Stefan: transferencia de calor en una barra unidimensional bifásica.

R. Martínez, R.D. Santiago, J.A. Otero, E.M. Hernández, A. Jiménez, F. Castillo.

Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey (ITESM), Campus EM. Atizapán de Zaragoza,
E.M. 52926, México.

Los problemas de frontera móvil corresponden a una clase de problemas de contorno para ecuaciones en derivadas parciales que describen el comportamiento físico de un conjunto de problemas de la ciencia y la técnica. Por ejemplo, el estudio del flujo de fluidos en medios porosos, procesos de transferencia de masa que incorporen transformaciones de fase, reacciones químicas y otros. En particular, pueden señalarse los procesos de congelación y descongelación de alimentos, producción de hielo, formación de hielo en superficies, corrosión en tuberías, prospección petrolera, crecimiento de tumores entre otros. En el trabajo se presenta una nueva propuesta de esquema en diferencias, para resolver el problema clásico unidimensional de frontera móvil de dos fases con condiciones de Dirichlet o Neumann. El esquema propuesto es de orden superior, por lo cual mejora la exactitud y velocidad de convergencia de la solución respecto a otros esquemas de diferencias utilizados anteriormente. Se realiza un conjunto de experimentos numéricos los cuales se validan comparados con soluciones analíticas y con otras aproximaciones numéricas reportadas en la literatura.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 1)

CONFERENCIA 05

Propiedades efectivas en materiales compuestos tridimensionales usando un modelo semi-analítico.

J.A. Otero^{1,2}, H. H. Cabanas^{2,3}, Reinaldo Rodríguez⁴, Guillermo Monsivais⁵ y Rolando Pérez³

¹Instituto Tecnológico de Estudios Superiores de Monterrey (ITESM), Campus EM. Atizapán de Zaragoza, E.M. 52926, México, ²Instituto de Cibernética, Matemática y Física ICIMAF, La Habana, Cuba. ³Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, México. ⁴Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, Cuba. ⁵Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM), México.

Es el estudio de las propiedades efectivas en materiales compuestos tridimensionales es un tema actual para el diseño y construcción de materiales compuestos. En este trabajo se presenta un modelo semi-analítico para calcular las propiedades efectivas de compuestos tridimensionales formados por inclusiones elipsoidales embebidas en una matriz. El modelo semi-analítico consiste en la solución de los problemas locales, obtenidos al aplicar el método de homogenización asintótico, usando el método de elemento finito. Se obtienen un conjunto de experimentos numéricos los cuales son comparados con modelos auto-consistentes. Casos límite son obtenidos y comparados con otros modelos.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 1)**

CONFERENCIA 06

Explotación del gas de esquisto. Relación con el incremento de la sismicidad

Oscar Sotolongo Costa

Universidad Autónoma del Estado de Morelos

Se exponen algunos detalles sobre la explotación del gas de esquisto por la técnica de la fracturación y se predice, según un modelo de terremotos basado en la interacción fragmentos-asperezas, cómo sería la distribución por intensidades de acuerdo a este modelo. Al comparar el modelo con el catálogo de sismos registrados recientemente en Oklahoma, donde se lleva a cabo una intensa exploración, se observa una muy buena concordancia. Se concluye que la hipótesis de que la fracturación sea la causa del incremento de la sismicidad es, cuando menos, aceptable.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 4)

CONFERENCIA 01

**Comparación de propiedades energéticas y estructurales del proceso de hidratación de los complejos
CH₃HgOH y CH₃HgCl. Un estudio a nivel DFT.**

J.I. Amaro Estrada^a, L. Maron^b y A. Ramírez Solís^a

^a*Departamento de Física, Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av. Universidad 1001. Cuernavaca, Morelos. 62209, México.*

^b*Université de Toulouse, INSA Laboratoire de Physicochimie de Nano-Objets, 135 Avenue de Rangueil, F31077 Toulouse, France*

Diversos aspectos ambientales y sociales involucran el problema de contaminación por Hg, principalmente aquellos que tienen como consecuencia enfermedades cutáneas y sistémicas en los humanos, además de los daños globales a ecosistemas completos. La exposición al metilmercurio tiene un interés crucial, porque se trata de una neurotoxina poderosa que constituye la mayoría del mercurio que se ha encontrado en peces y en mamíferos marinos [1]. Con la finalidad de obtener una perspectiva más extensa del proceso de solvatación acuosa de esta forma química del Hg, se reporta un estudio detallado de la hidratación por pasos de las especies CH₃HgCl y CH₃HgOH. La optimización de estructuras y el cálculo de energías libres de microsolvatación para los complejos CH₃HgXY-(H₂O) (XY=Cl, OH) hasta n=33 se llevó a cabo a nivel B3PW91/aug-RECP(Hg)-6-31G(d,p). Para ambas especies es posible observar tres interacciones directas Hg-O(agua) cuando se completa la primera capa de solvatación (n=33). Simulaciones de dinámica molecular Born–Oppenheimer DFT muestran la estabilidad térmica a T=300K de las estructuras CH₃HgCl-(H₂O)₃₃ y CH₃HgOH-(H₂O)₃₃, así mismo la persistencia del patrón de solvatación bipirámide trigonal alrededor del Hg. Se presenta la evolución de los principales parámetros geométricos intra e intermoleculares durante los 10 ps. de la simulación.

[1] R. Wagemann et al., Methylmercury and total mercury in tissues of arctic marine mammals. *Science of the Total Environment*, **1998** 218(1), p. 19-31.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 4)

CONFERENCIA 02

Procesos de dispersión y fragmentación en interacciones ion-molécula con acoplamiento electrón-núcleo

R. Cabrera-Trujillo

¹*Instituto de Ciencias Física, Universidad Nacional Autónoma de México,*

Ap. Postal 48-3, Cuernavaca, Morelos, 62251, México

trujillo@fis.unam.mx

En este trabajo se presentan nuevos e interesantes resultados para el proceso de dispersión, transferencia de carga, fragmentación y pérdida de energía inducidos por un proyectil al interactuar con un blanco atómico o molecular. Nuestro tratamiento se basa en el uso de la teoría Electron-Nuclear Dynamics (END) que consiste en un tratamiento no-adiabático que se basa en una descripción macro-molecular en términos de estados coherentes de la función de onda de los electrones y del núcleo. En la aproximación de núcleos clásicos (minimal END) la estructura electrónica está en términos de un solo determinante. Presentamos resultados para la sección eficaz de captura electrónica, fragmentación y frenamiento electrónico y nuclear para iones de H^+ , He^{2+} colisionando varios blancos atómicos y moleculares y se comparan con los datos experimentales y teóricos disponibles mostrando una buena a excelente acuerdo en la región de validez de la teoría.

Agradecemos el apoyo de UNAM-PAPIIT-110-714

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 4)

CONFERENCIA 03

Estudios teóricos de la transición de fase $\epsilon \rightarrow \zeta$ del oxígeno sólido

A. J. Ochoa-Calle, C. M. Zicovich-Wilson, A. Ramírez Solís
Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos,
Cuernavaca, 62209 Morelos. México

Hemos caracterizado las fases ϵ (no magnética) y ζ (conductora) del oxígeno sólido en el rango de presiones de 9.6 a 150.0 GPa mediante cálculos DFT periódicos en base atómica al nivel B3LYP/VTZP realizados con el programa CRYSTAL14.[1] El error porcentual relativo promedio de los parámetros de celda entre nuestros resultados y las observaciones experimentales es de menos de 0.5% a partir de 70 Gpa. La transición de fase $\epsilon \rightarrow \zeta$ en estas condiciones computacionales ocurre a 95 GPa, en perfecto acuerdo con el experimento. [2] Experimentalmente ambas fases tienen simetría $C2/m$ y contienen cuatro unidades O_2 en su celda unitaria. Sin embargo, estudios fonónicos de la fase ζ revelan un fonón imaginario a 110GPa cuyo vector de onda es $\mathbf{k}=(1/4,1/4,0)$, mostrando así que la fase ζ - O_2 con simetría experimental es un estado de transición. Siguiendo la dirección de propagación del modo imaginario se ha encontrado una estructura estable cuya celda unidad tiene simetría reducida $P1$ y su celda viene dada por la expansión de la original de acuerdo con la matriz $(x-y; 2x+2y; z)$ que contiene 16 unidades O_2 . La fase ϵ - O_2 no presenta fonón imaginario y es, por lo tanto, una estructura estable. En este contexto se discute el por que la descripción experimental R-X predice que la fase ζ es isosimétrica con la ϵ .

Se reporta además al mismo nivel de cálculo, la dependencia con la presión de las excitaciones electrónicas del carozo 1s a los orbitales π^* y σ^* , estando en muy buen acuerdo con resultados experimentales.

[1] R. Dovesi, R. Orlando, A. Erba, C. M. Zicovich-Wilson, B. Civalleri, S. Casassa, L. Maschio, M. Ferrabone, M. De La Pierre, P. D'Arco, Y. Noël, M. Causà, M. Rérat and B. Kirtman, *Int. J. Quantum Chem.*, 114, 1287 (2014).

[2] G. Weck *et al.*, *Phys. Rev. Lett*, 102, 255503 (2009).

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 4)**

CONFERENCIA 04

**Fuerzas de Dispersión de Largo Alcance en el Estudio Teórico-Computacional de Sistemas Cristalinos
Microporosos**

Erick Iván Román Román

Resumen: En esta charla mostramos como afectan las fuerzas de dispersión de largo alcance la estabilidad de las zeolitas puramente silícicas, y como la exactitud de los resultados obtenidos para la entalpía varían de acuerdo al tipo de funcional empleado. Se presenta además un nuevo esquema para calcular dicha energía, que consiste en una suma compuesta por las contribuciones del espacio directo, el espacio recíproco y un término auto-consistente.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015
MIÉRCOLES 14
(SALÓN 4)

CONFERENCIA 05

Obtención de materiales de poro grande a partir de zeolitas Naturales

Karell Valdiviés Cruz^{1,2} Anabel Lam¹ and Claudio M. Zicovich-Wilson²

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

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

Una alternativa a costosos métodos de síntesis de zeolitas de poro grande es la modificación química de materiales relacionados que se pueden encontrar fácilmente en la naturaleza. Uno de los tratamientos que permite realizar con bajo costo industrial la transformación de una zeolita de poro chico en un material de poro grande es similar al realizado para la llamada dealuminación en medio ácido. El principal problema con este tipo de técnicas es la manera de controlar las condiciones de modo de evitar la formación de productos finales amorfos.

En esta charla presentamos un estudio teórico sobre la clinoptilolita ácida, material que se obtiene mediante intercambio catiónico de la correspondiente zeolita natural y de los mecanismos que llevan a la formación de sólidos de poro más grande luego del tratamiento de dealuminación en medio ácido. ¹ El estudio teórico consiste en cálculos de química cuántica sobre modelos periódicos con el programa Crystal, ² que describen el material hidratado y los procesos a nivel electrónico y nuclear que ocurren durante la dealuminación.

Referencias

[1] Cruz, K. V.; Lam, A.; Zicovich-Wilson, C. M., J. Phys. Chem. A 2014, 118 , 5779–5789.

[2] Dovesi, R.; Orlando, R.; Erba, A.; Zicovich-Wilson, C. M.; Civalieri, B.; Casassa, S.; Maschio, L.; Ferrabone, M.; Pierre, M. D. L.; D'Arco, P.; Noel, Y.; Causa, M.; Rérat, M.; Kirtman, B., Int. J. Quantum Chem. 2014, 114, 1287–1317, DOI: 10.1002/qua.24658.

TÍTULOS Y RESÚMENES DE LOS CARTELES

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 01

Estructura electrónica y propiedades ópticas en pozos cuánticos de $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$ bajo la aplicación de campos eléctricos y magnéticos

K. A. Rodríguez-Magdaleno¹, R. Pérez-Álvarez, J. C. Martínez-Orozco²

¹ Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma del Estado de Morelos. Av. Universidad 1001, C.P. 62209, Cuernavaca, Morelos, México,

² Unidad Académica de Física. Universidad Autónoma de Zacatecas. Calzada Solidaridad esquina con Paseo a La Bufa S/N. C.P. 98060, Zacatecas, Zacatecas. México.

En este trabajo se presenta la estructura electrónica y las propiedades ópticas, en particular el cálculo del coeficiente de absorción de pozos cuánticos simples y dobles formados por los materiales semiconductores $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. El cálculo de la estructura electrónica se realiza en la aproximación de masa efectiva a una banda a través de un método de diagonalización [1] usando como base en la expansión las soluciones de un pozo cuántico infinito de ancho L , aplicando campos eléctricos y magnéticos en la dirección z y x , respectivamente. El coeficiente de absorción se obtiene a través de expresiones obtenidas del formalismo de matriz densidad [2] considerando únicamente transiciones intersubbanda. Los perfiles y estructura electrónica de los pozos simples y dobles se ven afectados por la presencia de los campos eléctricos y magnéticos, de igual forma también las propiedades ópticas.

[1] J. B. Xia and W.J. Fan., Phys. Rev. B, 40, 8508 (1989).

[2] H. Yildirim and M. Tomak, Eur.Phys. J. B 50, 559564 (2006).

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 02

Catastrophe Theory approach to cognitive decline

Oscar Sotolongo-Costa^{1,2}, L. M. Gaggero-Sager¹, F. Maestu³, J. T. Becker⁴, O. Sotolongo-Grau⁵

1.- Departamento de Física, Facultad de Ciencias. Universidad Autónoma del Estado de Morelos. México

2.- "Henri Poincaré" Group of Complex Systems, University of Havana, Cuba

3.- Laboratory of Cognitive and Computational Neuroscience (UCM-UPM), Centre for Biomedical Technology (CTB), Campus de Montegancedo s/n, Pozuelo de Alarcón, 28223, Madrid, Spain

4.- Department of Psychology, School of Medicine, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA, USA; Department of Neurology, School of Medicine, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA, USA; Department of Psychiatry, School of Medicine, University of Pittsburgh, Pittsburgh, PA, USA.

5.- Alzheimer Research Center and Memory Clinic, Fundació ACE, Institut Català de Neurociències Aplicades, Barcelona, Spain

Objectives: Aging associated cognitive decline often results in some kind of irreversible dementia. The goal of this work is to generate a simple mathematical description of the process of cognitive decline to dementia. The synthesis and compactness of such a formulation could help to refine and focus models and analyses that need to take into account the multitude of factors associated with normal and pathological cognitive aging.

Methods: We formulate the energetic balance of the cognition network to describe the cognition variations as functions of metabolic activity and the new defined "synaptic complexity", which characterizes the connections between several cognition networks.

Results: The model predicts that the neuronal network is exposed to an irreversible fall into poor cognition state due to losses of metabolic activity or synaptic complexity. However, this fall will be delayed if the combination of both variables remains high enough. Even after the irreversible fall occurs a little improving of the cognition could be reached by raising the metabolic activity of the brain.

Conclusions: This is a first catastrophe theory approach to cognitive decline. The cognitive decline appears as irreversible, as a consequence of the involved energy and the loss of synaptic complexity. Three important things emerge from the model. First, any kind of treatment must be applied as soon as possible to avoid the irreversible fall. Second, a combined treatment using cognitive stimulation and metabolic activity improvement must be taken into account in dementia therapy

Keywords: Neurodegeneration, Aging, Catastrophe theory, Mathematical model, Cognition

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015

POSTER 03

Espectro polaritónico de cristales fotónicos bidimensionales basados en materiales polares

H. A. Gómez-Urrea¹, M. E. Mora-Ramos¹

¹*Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México*

Se investigan las relaciones de dispersión de cristales fotónicos bidimensionales compuestos de cilindros de materiales polares uniaxiales en un fondo dieléctrico que exhiben excitaciones transversas de fonón-polariton, por medio del método de las diferencias finitas en el dominio del tiempo (FDTD) y la técnica de la ecuación diferencial auxiliar (ADE), que establece una relación entre el vector desplazamiento eléctrico y el vector campo eléctrico para tratar el medio dispersivo con una ecuación diferencial. Se considera la anisotropía de la función dieléctrica en la forma de una combinación de la contribución paralela (z) y perpendicular (t) de las relaciones polaritónicas y se toman distintos ejemplos del peso de esta. Las frecuencias de los modos electromagnéticos son obtenidas como los máximos locales del análisis espectral por medio de la transformada rápida de Fourier (FFT).

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 04

Propiedades ópticas no lineales en pozos cuánticos semiconductores: Efectos de láser intenso

R. L. Restrepo,^{1,2} F. Urgan,³ M. E. Mora-Ramos⁴, A. L. Morales², C. A. Duque²

Escuela de Ingeniería de Antioquia-EIA, Envigado, Colombia

²*Grupo de Materia Condensada-UdeA, Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales,
Universidad de Antioquia-UdeA, Calle 70 No. 52-21, Medellín, Colombia*

³*Department of Physics, Cumhuriyet University, 58140 Sivas, Turkey*

⁴*Facultad Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México*

Aquí se presentan los efectos de la presión hidrostática, la temperatura, y el campo eléctrico en los coeficientes de absorción óptica y los cambios del índice de refracción asociados con la transición inter-subbanda en un pozo cuántico graduado de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3} bajo efectos del campo de un láser intenso. Los valores propios de la energía y las funciones propias correspondientes de electrones en el pozo cuántico graduado se calculan dentro de la aproximación de masa efectiva y considerando la función de onda envolvente. Las expresiones analíticas de las propiedades ópticas se obtienen utilizando el método de la densidad de matriz compacta y un método iterativo. Los resultados numéricos demuestran que las propiedades ópticas lineales y no lineales dependen en gran medida del efecto del láser intenso y del campo eléctrico, pero débilmente de la presión hidrostática y de la temperatura. Además, se ha encontrado que las propiedades electrónicas y ópticas en un pozo cuántico de GaAs/Ga_{0.7}Al_{0.3} quedan bien sintonizadas cambiando estos agentes externos. Por lo tanto, estos resultados dan un nuevo grado de libertad en las aplicaciones de dispositivos optoelectrónicos construidos con estos materiales semiconductores.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015

POSTER 05

Cubiertas antirreflejantes para celdas solares cuánticas basadas en GaAs

M. de J. Luévano-Robledo¹, C. I. Cabrera-Perdomo¹, L. Hernández^{1,2}, A. Enciso¹ y D. A. Contreras-Solorio^{1*}

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Czada. Solidaridad y Paseo la Bufa S/N, 98060 Zacatecas, Zac.

²Facultad de Física, Universidad de La Habana, Colina Universitaria, 10400 La Habana, Cuba

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

Se estudia la reflectancia de cubiertas antirreflejantes monocapa, bicapa y tricapa para celdas solares cuánticas que consisten de una unión p-i-n de GaAs con pozos cuánticos de InGaAs y barreras de GaAsP insertados en la región intrínseca. El propósito de los pozos es extender la respuesta espectral del dispositivo a energías menores que la brecha prohibida del GaAs. El InGaAs tiene constante de red más grande que el GaAs y un gap menor, mientras que la constante de red del GaAsP es menor que la del GaAs con un gap mayor. El ancho del pozo y de la barrera se acomodan de tal manera que su constante de red promedio es igual a la del GaAs. A este tipo de celda se le llama de tensión balanceada. Se modela la reflectancia de cubiertas antirreflejantes con los materiales ópticos Al_2O_3 , ZrO_2 , MgF_2 y ZnS . Se calcula la dependencia de la reflectancia en el rango de longitudes de onda desde 300 a 1100 nm. También se calcula la reflectancia promedio ponderada en el espectro solar AM1.5 y se obtiene una reducción considerable de la reflectancia que hay sin cubierta antirreflejante al usar las bicapas $\text{MgF}_2/\text{ZrO}_2$ y MgF_2/ZnS . En los cálculos se usa el formalismo de matriz de transferencia.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 06

¿Cuáles son los tipos de pérdidas que existen en la transmisión acústica?

J. J Rodríguez-Pérez¹, R. A. Reyes-Villagrana¹, J. Madrigal-Melchor¹, D. A. Contreras-Solorio¹

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina paseo la Bufa, S/N, C.P. 98060, Zacatecas, Zacatecas, México

Es bien conocido que en las áreas de pruebas no-destructivas, en la acústica arquitectónica y ultrasonografía médica, es muy importante el análisis de la interacción de las ondas acústicas y la materia, con el objetivo de obtener la caracterización de los materiales; sin embargo, en los modelados se desprecia las pérdidas por atenuación, que pueden ser por absorción, dispersión, difracción, difusión, etc. En este trabajo se presenta un análisis e inspección de los espectros de transmisión de ondas acústicas en función de la frecuencia con múltiples interfaces entre diferentes materiales. Se utilizó la técnica de matriz de transferencia para calcular los espectros de transmisión. Se aplicó el agua como medio de propagación. Se muestran los espectros de transmisión de sistemas periódicos con incidencia normal. Se obtuvo los espectros de transmisión en función de la frecuencia de fluidos, sólidos y materiales biológicos. Se observan las pérdidas por los efectos de la atenuación dado el espesor de las interfaces, así como los coeficientes de absorción de cada uno de los materiales.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 07

Refracción de ondas acústicas en sistemas multicapas con incidencia oblicua

J. J. Rodríguez-Pérez¹, R. A. Reyes-Villagrana¹, J. Madrigal-Melchor¹, D. A. Contreras-Solorio¹

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina paseo la Bufa, S/N, C.P. 98060, Zacatecas, Zacatecas, México

Con el propósito de generar imágenes mediante la transmisión de ondas acústicas, en el siguiente trabajo se presenta la refracción de estas ondas aplicada en diversos materiales como los son fluidos, sólidos y materiales biológicos. El modelo teórico esta basado analizando la refracción de una, dos interfaces con incidencia oblicua. Se revisa el caso particular de una sistema multi-interfaces, utiliando la metodología de matriz de transferencia. Se obtuvieron los espectros en función del ángulo de incidencia. Se muestran los resultados obtenidos, se inspecciona hasta dónde se puede obtener información valiosa de los espectros en función del ángulo incidente y que información es desechable, obteniendo así una aproximación a los diferentes filtros existentes como por ejemplo los filtros pasa-bandas.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 08

Arquitectura de los detectores acústicos monocapa y multicapa: medición de la impedancia eléctrica

J.J. Rodríguez-Pérez¹, R. A. Reyes-Villagrana¹, J. Madrigal-Melchor¹, D. A. Contreras-Solorio¹

¹Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina paseo la Bufa, S/N, C.P. 98060, Zacatecas, Zacatecas, México

La espectroscopia de impedancias permite la resolución (separación) de las diferentes contribuciones a la impedancia total de un material. Esta resolución está basada en el hecho de que la constante de tiempo para cada proceso es diferente. En algunos casos, sin embargo, parece que no existe una sola constante de tiempo para un proceso determinado, sino que debido a cuestiones estructurales, se presenta una distribución de constantes de tiempo. En este trabajo, se presentan diagramas Cole – Cole de detectores acústicos piezoeléctricos utilizando el piezopolímero PVDF. Se construyeron varios detectores acústicos monocapa y multicapa, utilizando un conector BNC, una contra-masa de Hierro-Níquel, pegamento epóxico conductor, y el material activo PVDF con un diámetro de 8mm. Los resultados muestran la influencia del conector BNC y el pegamento epóxico conductor en las mediciones de la impedancia por medio de la representación de Nyquist.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015

POSTER 09

A model for multiple particle breaking

O. Sotolongo-Costa^{1,2}, L. M. Gaggero-Sager¹, M. E. Mora Ramos¹

1-Dpto de Física, UAEM

2- Cátedra de sistemas Complejos “Henri Poincaré”, Universidad de La Habana

A time-dependent statistical description of multiple particle breakage is presented. The approach combines the Tsallis non-extensive entropy with a fractal kinetic equation for the time variation of the number of fragments. The obtained fragment size distribution function is tested by fitting some experimental reports.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 10

Velocity profile in oil-water flows in micro-channels

E. E. Ramírez-Miquet,^{1,2,3} O. Sotolongo-Costa,^{4,5} A. Quotb,^{2,3} J. Perchoux,^{2,3} K. Loubière^{6,7} and L. Prat^{6,7}

¹ Centro de Aplicaciones Tecnológicas y Desarrollo Nuclear, Calle 30, No. 502, Miramar 11300, La Habana,
Cuba

² Univ de Toulouse, INP, LAAS, F-31400 Toulouse, France

³ CNRS, LAAS, Ave du Colonel Roche, F-31400 Toulouse, France

⁴ Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca 62209 Morelos, Mexico

⁵ Cátedra de Sistemas Complejos “Henri Poincaré”, Universidad de La Habana, Vedado 10400, La Habana,
Cuba

⁶ CNRS, Laboratoire de Génie Chimique (LGC UMR 5503), 31432 Toulouse, France

⁷ Univ de Toulouse, INPT, ENSIACET, 31432 Toulouse, France

We study oil-water flows in a Y-shape rectangular cross-section microreactor with different parameters at each inlet. A theoretical model is proposed and Navier-Stokes equation is resolved for the relative movement in between oil and water plates. The model is further validated with preliminary measurements for flow profile reconstruction using optical feedback interferometry.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 11

Propiedades ópticas de partículas anidadas usando medio efectivo

Rafael Alberto Díaz Hernández Rojas, Raúl Patricio Esquivel Sirvent, and Ana Cecilia Noguez Garrido

Instituto de Física, UNAM

En este trabajo se desarrolla un nuevo modelo de medio efectivo, al que se denomina *homogeneización recursiva*, que permite obtener la permitividad efectiva ϵ de partículas anidadas de diversas geometrías, y así reproducir sus propiedades ópticas (Secciones/Eficiencias de absorción, esparcimiento y extinción) de manera aproximada. Se sabe que estas propiedades ópticas están relacionadas con las resonancias plasmónicas que ocurren en la superficie de las partículas, cuya posición, ancho e intensidad dependen tanto de los materiales de los que estén compuestas las partículas, como de sus dimensiones y geometría. Más aún, al tratar con partículas anidadas –estructuras que contienen capas de distintos materiales, una dentro de otra – las capacidades de sintonización de las resonancias es aún más versátil. Sin embargo, al tratar con este tipo de sistemas anidados, los métodos para predecir sus propiedades ópticas se vuelven elaborados y sólo existen soluciones analíticas para casos muy limitados y simétricos; *e.g.* esferas concéntricas.

Con el modelo de homogeneización recursiva este tipo de sistemas pueden estudiarse independientemente del número de cascarones que formen a la partícula, construyendo a partir de ir homogeneizando una capa a la vez. Para esto, el núcleo de la partícula se asume como una inclusión dentro del primer cascarón y se aplica la ecuación de homogeneización que aquí se planteó, con lo que se obtiene ϵ_1 . Esta nueva partícula homogeneizada será considerada ahora como una inclusión del segundo cascarón y aplicando la misma ecuación, se obtendrá la siguiente permitividad efectiva, ϵ_2 . Este método se sigue hasta que todas las capas de la partícula hayan sido consideradas, para concluir finalmente que para una estructura con N cascarones y un núcleo, $\epsilon_N = \epsilon$. Una vez que se conoce la permitividad efectiva de la partícula, puede suponerse que se tiene un sistema con las mismas dimensiones exteriores, pero homogéneo.

Este método ha mostrado que pueden reproducirse, en buena aproximación, las propiedades ópticas que se obtienen por otros métodos, como representación espectral o teoría de Mie generalizada a varias capas esféricas. Por otro lado, al tratar con elipsoides o esferoides anidados y cofocales, se reproducen los mismos resultados analíticos que cuando se abordan estos sistemas en el régimen cuasiestático. Además, permite estudiar partículas no cofocales – *e.g.* una esfera embebida dentro de un elipsoide – sin hacer ningún otro tipo de aproximación. Finalmente, en combinación con el método de representación espectral, se han podido aproximar también las resonancias que ocurren en estructuras más complicadas, como partículas cúbicas de plata con inclusiones esféricas de oro.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015

POSTER 12

Síntesis y Caracterización de Nanopartículas de Oro

Olinka Johani Ramírez Soto

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México



Se llevó a cabo la síntesis de nanopartículas de oro por reducción de HAuCl_4 con Citrato de Sodio, las cuales fueron caracterizadas por medio de espectroscopia UV-visible y microscopía de transmisión electrónica. Debido al papel que juega el Citrato de Sodio, como reductor y estabilizador, se sugirió una modificación a la síntesis seguida; que consistió en variar la cantidad

de disolución que contiene a este reactivo que se agrega a la mezcla. Manteniendo los demás parámetros fijos se aseguró que las diferencias derivadas, en las nanopartículas de las disoluciones hechas, dependieran únicamente de este cambio. En total se hicieron 6 muestras; con 1, 1.5, 2, 3, 4 y 5mL de disolución acuosa de Citrato de Sodio. Analizando sus espectros de absorción se determinó cualitativamente que el tamaño de las nanopartículas presentó una tendencia a disminuir conforme la cantidad de Citrato de Sodio aumentó. Lo cual se confirmó a partir de mediciones hechas con las imágenes de TEM para las muestras de 1, 3 y 5mL de disolución de Citrato de Sodio; produciéndose nanopartículas de diámetro promedio de 33, 17 y 14nm, respectivamente.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015

POSTER 13

Voltage contact effects on nonlinear and linear optical absorption in delta-MIGFET transistor under magnetic field

O. Oubram¹, I. Cisneros-Villalobos¹, M. Limón-Mendoza¹, F. Aquino Roblero¹, Lorena Díaz González²

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

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

oubram@uaem.mx

The intersubband optical absorption in delta-MIGFET transistor (delta-Multiple Independent Gate Field Effect Transistor) is theoretically investigated for different applied magnetic field and voltage contact. Our results show that the position and the magnitude of the linear, nonlinear and total absorption coefficient are sensitive to the combined effects magnetic field and voltage contact.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 14

Estrategias y algoritmos de auto organización y auto protección en redes de sensores inalámbricas.

M. Limón-Mendoza¹, O. Oubram¹, I. Cisneros-Villalobos¹, F. Aquino Roblero¹, Lorena Díaz González²

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

²Facultad de Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México.
Mario.limon@uaem.mx

Las redes de sensores inalámbricas (WSN) plantean infinidad de aplicaciones en las que gran cantidad de nodos colaboran para un objetivo común. Se muestran algoritmos y estrategias de auto organización (Self-organization) y auto protección (Self-protection) enfocados a algunas aplicaciones en redes de sensores inalámbricas.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 15

Medición y Simulación de Sobretensiones Transitorias Típicas en una Red de Potencia Debido a Maniobras con Bancos de Capacitores

Luis Cisneros Villalobos, Outmane Oubram, Francisco Aquino Roblero, Mario Limón Mendoza, Lorena Díaz González.

Se presentan señales transitorias de tensión medidas durante la energización de bancos de capacitores en la red de potencia de 85 kV de la zona central del país las cuales se utilizan para validar un modelo digital en el Alternative Transients Program que representa al sistema en cuestión, de tal forma que este reproduzca las señales reales transitorias. Además, el modelo funciona como una herramienta para observar el comportamiento de señales tanto de tensión como de corriente en puntos donde no se tienen las señales reales y así estimar las magnitudes de los transitorios dependiendo de la topología de la red, y obtener información adicional a la capturada a partir del evento real, de manera tal que sea útil para trabajos teórico prácticos futuros. Las sobretensiones son típicas y frecuentes en las redes de potencia las cuales pueden generar efectos indeseados al combinarse con las condiciones operativas de la red.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015

POSTER 16

About time variation of Entropy and Its relation with Geometry of Phase Space

Oscar Sotolongo Costa^{1,2}, L.M. Gaggero Sager¹, E.R. Pujals³

1- Dpto de Física, UAEM. Cuernavaca, Morelos.

2- Cátedra de Sistemas Complejos "Henri Poincaré", UH. La Habana

3- Instituto de Matemática Pura e Aplicada - IMPA. Dona Castorina 110, Rio de Janeiro.

Starting from a general behavior of phase space volume with time we arrive to different formulations of entropy temporal behavior. We recast the entropy creation problem in terms of the relation between the increase of the phase space volume and the number of accessible states. Particular cases, including Pesin relation, emerge from this formulation.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 17

Optimización de la eficiencia de un concentrador solar de canal parabólico mediante inteligencia artificial

A. Bassam¹, Luis J. Ricalde¹, Eduardo E. Ordoñez¹, O. Oubram²

¹Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Yucatán, México.

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

Para generar la modelación matemática del sistema de concentradores solares de canal parabólico se empleó un esquema basado en redes neuronales artificiales (RNA) utilizando el software de cálculo matemático MATLAB®, a través de su herramienta toolbox ANN. Se trabajó con una base de datos experimental compuesta por: la eficiencia del sistema (η_{exp}) empleada como la variable de salida; la temperatura de entrada del fluido (T_i [°C]), la temperatura de salida del fluido (T_o [°C]), la temperatura ambiente (T_a [°C]), la radiación solar (G_b [W/m²]) y el flujo del fluido (F [l/min]); las cuales fungieron como variables de entrada. Se desarrolló una arquitectura de Red Neuronal Artificial (RNA) de tres capas con funciones de transferencia Tangente Hiperbólica en la capa oculta y lineal en la capa de salida. La red fue entrenada con la base de datos experimental, antes mencionada, ocupando el algoritmo de Levenberg–Marquardt (LM) para la optimización de los pesos y bias, a partir de los cuales se realiza el modelo matemático. Los resultados obtenidos fueron validados empleando los métodos estadísticos de Coeficiente de Determinación (R), Coeficiente de Correlación (R²) y el Error Medio Cuadrático (RMSE). Una vez generado el modelo matemático se procedió a realizar un análisis de sensibilidad de las variables de entrada mediante el algoritmo de Garson, para conocer la relevancia de cada una de las variables en la eficiencia del sistema.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 18

The Use of Artificial Neural Networks with Evolutionary Algorithms for Detection and Classification of Explosives

Dr. Youness El Hamzaoui¹ and Dr. Ali Bassam²

1: Instituto de Ingeniería y Tecnología, Dpto. Ingeniería Eléctrica y Computación, Ciudad Universitaria.
Universidad Autónoma de Ciudad Juárez (UACJ), Av. Del Charro # 450 Norte, CP 32310, AP 1594-D Ciudad
Juárez, Chihuahua, Mexico

2: Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Yucatán, México

An explosive material is a reactive substance that contains a great amount of potential energy that can produce an explosion it released suddenly. Explosive detection is a non-destructive inspection process to determine whether a container contains explosive material. Explosive detection is commonly used at airport, ports and for border control. However, detection explosive is a complex process. The remarkable thing is that each object, such an explosive material, must radiate energy at an infinite rate into electromagnetic waves with frequencies. Since, all physical things are made of atoms, the basic units of chemistry and biology and the building blocks out of which we, and everything around us, are made. As we know that, if light from the object passes through a prism, it breaks up into its component colors (its spectrum) as in a rainbow. By focusing a telescope on an individual molecules, one can similarly observe spectrum of the light from that physical thing. Different molecules have different spectra, but the relative brightness of the different colors is always exactly what one would expect to find in the light emitted by an object, this means that we can tell an object's temperature from the spectrum of its light. Meanwhile, that each chemical element absorbs a characteristic set of a very specific colors, we can determine exactly which elements are present in the material. During recent years, some researchers have been developed new technology based on artificial intelligence as artificial neural network, type multilayer neural network with back propagation learning algorithms for detection and classification of explosives. However, their algorithms about the artificial neural network are not really complete, because they contain a number of parameter whose values cannot be predicted from the algorithms but have to be chosen to fit in with experiment. Therefore, the objective of this investigation is to develop an integrated approach using artificial neural network (ANN) coupling with genetic algorithms (GAs) and particle swarm algorithms (PSA) within the terahertz spectrum (2.5THZ – 5THZ). In addition, The artificial neural network are good because are simple, made definite predictions and could be tested by observations and could be automatically programmed to detect and classify explosives from natural substances, adopting cases studies to accomplish the comparative with the current one used in the detection of explosives. We shall demonstrate, that this methodology is highly efficient in terms of detection speed, classification and high success rates. Hence, the design and manufacture new devices and gadgets of explosive detection based on this technology would be reduce the cost of security checkpoints operation, homeland security, force protection, improving the satisfaction of customers, preserving life, property and the environment.

Keywords: artificial intelligence, evolutionary algorithms, spectrum microwave, explosive detection.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 19

Aplicación de variantes numéricamente estables del MMT derivadas de la Ecuación Sturm-Liouville matricial

R. Pernas-Salomón¹ & R. Pérez-Álvarez¹, Zorayda Lazcano Ortiz² & Jesús Arriaga Rodríguez², José Alberto Briones Torres³ & Isaac Rodríguez Vargas³

¹Universidad Autónoma del Estado de Morelos, ave. Universidad 1001, Cuernavaca, Morelos, C.P. 62209, México.

²Instituto de Física Luis Rivera Terrazas, BUAP, ave. San Claudio, esq. 18 sur, edif. 14B, Ciudad Universitaria, Col. San Manuel, Puebla, C.P. 72570, México.

³Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, calzada Solidaridad, esq. con paseo a la Bufa S/N, Campus Universitario II, Zacatecas, Zac, C.P. 98060, México.

El estudio excitaciones elementales en sistemas multicapas (heteroestructuras) continua siendo un campo de investigación muy activo debido a las múltiples aplicaciones de estos sistemas en el diseño de dispositivos en base a materiales compuestos. Una amplia gama de estos problemas físicos y tecnológicos pueden ser descritos por ecuaciones de movimiento que siguen el patrón Sturm-Liouville matricial [1]. Desde el punto de vista formal el **método de la matriz de transferencia (MMT)** es una técnica apropiada para estudiar la propagación de dichas excitaciones en sistemas multicapas. Sin embargo, las aplicaciones prácticas de este método pueden verse afectadas por inestabilidades numéricas, siendo la más común el problema Ωd [2,3,4]. La aparición de esta inestabilidad numérica es más probable cuando los elementos matriciales consisten en la suma de términos exponenciales con argumento real, unos crecientes y otros decrecientes con el incremento del espesor de las capas. Partiendo de la ecuación Sturm-Liouville matricial (**ESLM**) tomada como patrón pueden construirse matrices numéricamente estables cuyas dimensiones son independientes del número de capas del sistema. Este es el caso, por ejemplo de la matriz híbrida (**H**) y de la matriz de dispersión (**S**).

[1] R. Perez- Alvarez and F. Garca-Moliner. *Transfer Matrix, Green Function and related techniques: Tools for the study of multilayer heterostructures*. Universitat Jaume I, Castellon de la Plana, Spain, 2004.

[2] Tan, E. L., *Hybrid compliance-stiffness matrix method for stable analysis of elastic wave propagation in multilayered anisotropic media*, *J. Acoust. Soc. Am.*, Vol. 119, No. 1, 45-53, 2006.

[3] Lowe, M.J.S., *Matrix techniques for modeling ultrasonic waves in multilayered media*, *IEEE Trans. Ultrason., Ferroelect., Freq. Contr.*, Vol. 42, No. 4, 525-542, 1995.

[4] H. Calas, R. Rodríguez-Ramos, J. A. Otero, L. Leija, A. Ramos, and G. Monsivais, *Dispersion curves of shear horizontal wave surface velocities in multilayer piezoelectric systems*, *Journal of Applied Physics*, 107(4): 044511-1--044511-9, 2010.

- [5] F. Tisseur and K. Meerbergen, *The Quadratic Eigenvalue Problem*, SIAM Review, 43(2): 235-286, 2001.
- [6] A.-Li Chen and Yue-Sheng Wang, *Study on band gaps of elastic waves propagating in onedimensional disordered phononic crystals*, Physica B: Condensed Matter, 392(12): 369 -378, 2007.
- [7] M.B. de la Mora, O.A. Jaramillo, R. Nava, J. Tagüeña-Martínez and J. A. del Río, *Viability study of porous silicon photonic mirrors as secondary reflectors for solar concentration systems*, Solar Energy Materials and Solar Cells, 93(8): 1218 -1224, 2009.
- [8] S. Mukhopadhyay, R. Biswas, and C. Sinha, *Tunable Fano resonances in the ballistic transmission and tunneling lifetime in a biased bilayer Graphene nanostructure*, Physics Letters A, 375: 2921-2927, 2011.
- [9] S. Mukhopadhyay, R. Biswas, and C. Sinha, *Signature of quantum interference and the Fano resonances in the transmission spectrum of bilayer graphene nanostructure*, Journal of Applied Physics, 110(1): 014306-1--014306-7, 2011.
- [10] Nicholas J. Higham. *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 2nd edition, 2002.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 20

Transmitancia y energías de escape en sistemas de barreras con anchos modulados por una función gaussiana.

*María de la Luz Silba-Vélez, *R. Pérez-Álvarez y **D. A. Contreras-Solorio

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

** 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. 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.

En trabajos previos se han tomado sistemas donde la altura de las barreras están moduladas por una función gaussiana donde se observa que el coeficiente de transmisión muestra zonas de transparencia. En

el caso del problema de escape ($E = E_r + i\Gamma$) las E_r de ancho $\left(-\frac{\Gamma}{2}, \frac{\Gamma}{2}\right)$ se localizan cercanas a las zonas de transparencia. Aunque la coincidencia no es exacta, asociamos el aumento del ancho de las energías de escape con la formación de bandas de transparencia. Ahora bien, resulta más fácil construir sistemas donde se puede controlar el ancho de las barreras en vez de la altura, por tanto a lo largo de este trabajo se estudian el coeficiente de transmisión y el problema de escape en estructuras formadas por sistemas en los cuales el ancho es modulado por una función gaussiana. Este tipo de estructuras son de particular interés ya que con ellos se pueden obtener filtros de electrones. El estudio se realiza bajo el marco de la teoría de masa efectiva para ello se recurre al formalismo de matrices de transferencia.

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 21

Propiedades de transmisión de electrones de Dirac en una y dos barreras tensionadas en grafeno

M. Macías-Mier and I. Rodríguez-Vargas

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

El grafeno es un alótropo cristalino bidimensional del carbono con átomos dispuestos en un patrón regular hexagonal. El material presenta una serie de características muy interesantes como transparencia, alta conductividad eléctrica y térmica, dureza, exhibilidad y elasticidad que lo convierten en un material bastante prometedor. Sin embargo, para su implementación en el ámbito tecnológico es necesario modular las propiedades de transporte y su estructura de bandas. Existen diversos mecanismos que nos ayudan a modificar dichas características: implementando campos electrostáticos, campos magnéticos o campos electromagnéticos, perturbando la simetría mediante sustratos o aplicando una deformación mecánica al material. En este trabajo se analizará el caso de barreras generadas al aplicar tensión a la sábana de grafeno, un mecanismo que se ha sugerido para explotar tecnológicamente este material [1-3]. El análisis se efectuará considerando un estiramiento con dirección arbitraria y para mayor generalidad se cuenta con la presencia de un campo electrostático. Se demostrará que los cambios que ocurren son deformaciones en el cono de Dirac y el desplazamiento de los puntos de Dirac en el espacio recíproco. Además se calculará la transmisión en los sistemas caracterizados por una y dos barreras.

1. F. Guinea, M. I. Katsnelson and A. K. Geim, Nat. Phys. 6, 30 (2010).
2. V. M. Pereira and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. Lett. 103, 046801 (2009).
3. F. M. D. Pellegrino, G. G. N. Angilella and R. Pucci, Phys. Rev. B 84, 195404 (2011).

**OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015**

POSTER 22

Superredes de barreras magnetoelectricas en grafeno: Transmisión, transporte y estructura electrónica

V. H. Carrera-Escobedo, J. R. Suárez-López, J. Madrigal-Melchor, I. Rodríguez-Vargas

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

Las superredes son sistemas periódicos de gran interés, tanto desde el punto de vista tecnológico como el fundamental, debido a las propiedades físicas que sustentan. De hecho, prácticamente cada nuevo material que aparece en escena está obligado a ser estudiado bajo los efectos de potenciales periódicos, tal es el caso del grafeno. Hoy día se sabe que las propiedades de transmisión en grafeno pueden ser moduladas con relativa facilidad por medio de patrones periódicos, los cuales pueden ser impuesto al material por diversos mecanismos. En el presente trabajo estudiamos el efecto combinado de campo electrostático y campo magnético periódico en grafeno. Específicamente estudiamos las propiedades de transmisión, transporte y estructura de niveles. Asimismo ponemos especial énfasis en la relación que existe entre la estructura de niveles y la conductancia.

OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR
UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE MORELOS
ENERO 12-14, 2015

POSTER 23

Propiedades efectivas de laminados termo-magneto-electro-elásticos

Joanka Hernández Cabanas, José Antonio Otero Hernández, Guillermo Monsivais Galindo, Gladis Cabanas Gómez

La obtención de coeficientes efectivos en compuestos laminados ha sido abordada por varios autores. En la mayoría de estos casos se particularizan los métodos para compuestos conformados por constituyentes de simetría 6mm y en mucho de ellos despreciando el flujo térmico.

En este trabajo mediante el MHA se obtendrán las características globales de laminados termo-magneto-electro-elásticos con constituyentes triclinicos considerando un flujo térmico distinto de cero en el material. Se llega a una matriz general para resolver los problemas locales magneto-electro-elásticos y se calculan posteriormente los coeficientes relacionados con las propiedades térmicas.

POSTER 24

Sistemas unidimensionales: coeficientes de transmisión y energías de escape

*María de la Luz Silba-Vélez, *R. Pérez-Álvarez y **D. A. Contreras-Solorio

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

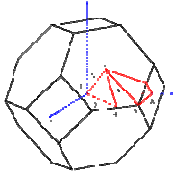
** Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Zacatecas, México.

En las últimas décadas los avances tecnológicos demandan estudiar heteroestructuras debido al gran impacto en aplicaciones como diseño de láseres, almacenamiento de información, dispositivos ahorradores de energía, entre otras. Por ello, es de gran interés estudiar y entender sus propiedades ópticas y electrónicas.

A lo largo de este trabajo se muestra una colección de diferentes sistemas unidimensionales para los se han calculado los coeficientes de transmisión y se ha resuelto el problema de escape. El estudio se realiza bajo el marco de la teoría de masa efectiva y el formalismo de matrices de transferencia.

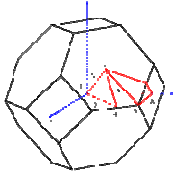
Dependiendo de parámetros como altura de las barreras, anchos de barreras/pozos y del potencial en ciertos sistemas aparecen bandas de transparencia y de rechazo mejor definidas que en otros. Las soluciones del problema de escape son complejas $E = E_r + i\Gamma$ donde E_r es la energía del estado y

el ancho $\left(-\frac{\Gamma}{2}, \frac{\Gamma}{2}\right)$ está relacionado con el tiempo de vida del estado. Las E_r se localizan cercanas a las zonas de transparencia.



OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR

Cuernavaca, 12-14 de enero de 2015



OCTAVO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR

Cuernavaca, 12-14 de enero de 2015