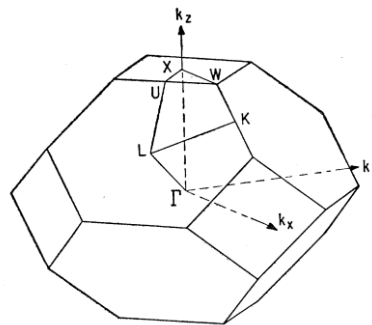




Universidad Autónoma del Estado de Morelos  
Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas  
Centro de Investigación en Ciencias

# Décimo Cuarto Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular



28-30 / 09 / 2020



## Índice

Índice .....	3
Instituciones organizadoras y patrocinadoras.....	8
Comité Organizador .....	8
Algunos datos de carácter organizativo.....	8
Programa .....	10
LUNES 28 DE SEPTIEMBRE. MAÑANA. Presiden la sesión Isaac Rodríguez Vargas y Leovildo Diago Cisneros .....	10
LUNES 28 DE SEPTIEMBRE. TARDE. Presiden la sesión Outmane Oubram y Karla Arely Rodríguez Magdaleno.....	10
MARTES 29 DE SEPTIEMBRE. MAÑANA. Preside la sesión Ernesto Manuel Hernández Cooper .....	11
MARTES 29 DE SEPTIEMBRE. TARDE. Preside la sesión Juan Carlos Martínez Orozco .....	11
MARTES 29 DE SEPTIEMBRE. SESIÓN DE FENÓMENOS FOTOVOLTAICOS. Presiden la sesión Osvaldo Vigil Galán y Maykel Courel Piedrahita .....	12
MIÉRCOLES 30 DE SEPTIEMBRE Preside la sesión Rolando Pérez Álvarez .....	13
TÍTULOS Y RESÚMENES DE LAS CONFERENCIAS EN LÍNEA.....	14
Lun01 10:10-11:00 Applications of hard X-ray nanoprobes in materials science, Gema Martínez Criado .....	16
Lun 02 11:00-11:30 Estudio computacional de interfaces $\text{Cu}_2\text{O}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ en celdas solares de perovskita, Eduardo Menéndez-Proupin <sup>1*</sup> , Jesús E. Castellanos-Águila <sup>2</sup> , Lucas Lodeiro <sup>1</sup> , Ana L. Montero-Alejo <sup>3</sup> , Pablo Palacios <sup>4</sup> , José C. Conesa <sup>5</sup> , Perla Wahnón <sup>4</sup> .....	17
Lun 03 11:30-12:00 Estudios benchmark ab initio de los estados de campo de ligando $2\Sigma_g^+$ , $2\Pi_g$ y $2\Delta_g$ de $\text{AgI}_2$ incluyendo los efectos spín-órbita, Alejandro Ramírez Solís.....	18
Lun 04 12:00-12:30 Flat bands beyond twisted bilayer graphene, Eric Suárez Morell .....	19
Lun 05 12:30-13:00 Stability, ultrastability and charge distribution in silver, gold and bimetallic clusters: the $\text{Ag}_{44-x}\text{Au}_x(\text{sr})_{30}^{4-}$ and $\text{Ag}_{25-x}\text{Au}_x(\text{Sr})_{18}^{1-}$ cases, C. Morera-Boado <sup>a</sup> , F. Hidalgo <sup>a</sup> and C. Noguez <sup>a</sup> .....	20
Lun 06 15:00-15:30 Análisis de un modelo unidimensional de PCM, Rubén Dario Santiago, Ernesto Manuel Hernández Cooper, Rolando Pérez Alvarez y José Antonio Otero Hernández.....	21
Lun 07 15:30-16:00 Efectos de tamaño finito de la zona de difusión en la estimación de los coeficientes efectivos de difusión durante la nitruración gaseosa de hierro puro, Ernesto M. Hernández, Rubén D. Santiago, Francisco Castillo, Joaquín Oseguera, Dulce Melo, José A. Otero .....	22
Lun 08 16:00-16:30 Estimación de la línea de saturación líquido-sólido en un fluido de esferas suaves mediante un muestreo sesgado en el parámetro de orden de Steinhardt, Diego López Bernal, Ernesto Hernández Cooper, José A. Otero .....	23
Lun 09 16:30-17:00 Estimación de propiedades macroscópicas de materiales elásticos heterogéneos, R. Rodríguez Ramos <sup>1</sup> , Mónica Tapia Gaspar <sup>2</sup> , José A. Otero <sup>2</sup> .....	24

Lun 10 17:00-17:30 Cálculo de propiedades efectivas en compuestos visco-elásticos fibrosos, Raúl Martínez-Rosado, José A. Otero, Reinaldo Rodríguez Ramos.....	25
Lun 11 17:30-18:00 Propiedades de la transmisión cuántica para las estructuras multibarrera de Cantor, subCantor y subCantor simétrico, Dr. Dan Sidney Díaz Guerrero.....	26
Lun 12 18:00-18:30 Two lane traffic flow with moving and fixed defect, Nouredine Lakouari <sup>1,2,*</sup> , Julio César Pérez-Sansalvador <sup>1,2</sup> , Jesús Garcia-Diaz <sup>1,2</sup> and Saúl E. Pomares Hernández <sup>1,3</sup> .....	27
Mar 01 10:00-10:30 Anomalous energy flow in passive elastic layers with exceptional points, Gal Shmuel, Ben Lustig, Guy Elbaz, Alan Muhafra .....	28
Mar 02 10:30-11:00 Optoelectronic properties of exciton trapped by a donor impurity in a single spherical quantum dot, E. FEDDI .....	29
Mar 03 11:00-11:30 Excitons in spherical colloidal quantum dots, R. L. Restrepo <sup>1</sup> , Walter Ospina-Muñoz <sup>1</sup> , E. Feddi <sup>2</sup> , M. E. Mora-Ramos <sup>3</sup> , J. A. Vinasco <sup>4</sup> , A. L. Morales <sup>4</sup> and C. A. Duque <sup>4</sup> .....	31
Mar 04 11:30-12:00 Efecto Berreman en metamateriales bimetálicos, F. Pérez-Rodríguez <sup>1</sup> , S. Cortés-López <sup>1</sup> , S.L. Gastélum-Acuña <sup>2</sup> , F.J. Flores-Ruiz <sup>3</sup> , V. Garcia-Vazquez <sup>1</sup> , R. García-Llamas <sup>4</sup> .....	32
Mar 05 12:00-12:30 Polarímetro de estado sólido de un sólo disparo basado en GaAsN, Alejandro Kunold .....	33
Mar 06 12:30-13:00 Estructura electrónica de sistemas con pozos cuánticos delta-dopados múltiples, Humberto Noverola Gamas <sup>1,*</sup> , Outmane Oubram <sup>2</sup> , Luis Manuel Gaggero Sager <sup>3</sup> .....	34
Mar 07 15:00-16:00 Diseño de nanocomplejos teranósticos para la entrega dirigida de medicamentos, terapia fotodinámica y terapia fototérmica contra cáncer de mama HER2+, Elder De la Rosa <sup>1,*</sup> , Gonzalo Ramirez <sup>2</sup> , Sandeep Panikar <sup>3</sup> , Pedro Salas <sup>3</sup> , Tanya Camacho <sup>4</sup> .....	35
Mar 08 16:00-16:30 Comportamiento de heteroestructuras 2D G/hBN al variar la distancia entre capas, R. M. Torres-Rojas <sup>1,2,*</sup> , D. A. Contreras-Solorio <sup>3</sup> , L. Hernández <sup>4</sup> and A. Enciso <sup>3</sup> .....	37
Mar 09 16:30-17:00 Effects of disorder on the transport and thermoelectric properties of silicene superlattices, <i>O.Oubram<sup>a</sup>, O.Navarro<sup>b</sup>, E.J.Guzmán<sup>c</sup>, I.Rodríguez-Vargas<sup>c</sup></i> .....	38
Mar 10 17:00-17:30 Efectos termoeléctricos en superredes aperiódicas basadas en grafeno, Sergio Molina Valdovinos, Eric J. Guzman, I. Rodriguez-Vargas .....	39
Mar 11 17:30-18:00 Self-similar transport, spin polarization and thermoelectricity in complex silicene structures, R. Rodríguez-González <sup>1</sup> , L. M. Gaggero-Sager <sup>2</sup> and I. Rodríguez-Vargas <sup>1</sup> .....	40
Mar 12 18:00-18:30 Extracción de características usando Procesamiento Digital de Señales, Seuret-Jiménez Diego <sup>1</sup> , Trutié-Carrero Eduardo.....	41
Martes 01 Status and perspectives of emerging thin film photovoltaic inorganic materials, Z. Jehl <sup>1</sup> , J. Puigdollers <sup>1</sup> , M. Placidi <sup>1</sup> , S. Giraldo <sup>2</sup> , K. Tiwari <sup>2</sup> , E. Saucedo <sup>1,*</sup> .....	43
Martes 02 The effect of Se/(S+Se) compositional ratios on the performance of SnS-based solar cell: a numerical simulation, Isaac Montoya De Los Santos <sup>a,*</sup> , Hugo J. Cortina-Marrero <sup>a</sup> , L. Hechavarría-Difur <sup>a</sup> , F. J. Sánchez-Rodríguez <sup>b</sup> , C. A. Meza-Avenidaño <sup>c</sup> , J. A. Borrego-Pérez <sup>d</sup> , Víctor I. Moreno-Oliva <sup>a</sup> , Edwin Román-Hernández <sup>a</sup> , Maykel Courel <sup>e</sup> .....	44
Martes 03 Semiconductor thin films for energy conversion, P. K. Nair .....	45

Martes 04 Estado actual y perspectivas de nuevas celdas solares emergentes basadas en calcogenuros de antimonio, Osvaldo Vigil Galán.....	46
Martes 05 Celdas solares reducidas en cadmio, M.L. Albor-Aguilera <sup>1*</sup> , U. Galarza-Gutierrez <sup>1</sup> , J.A. Ortega Cárdenas <sup>1</sup> , C. Hernandez Vasquez <sup>2</sup> , M.A. GonzálezTrujillo <sup>2</sup> .....	47
Martes 06 Películas de óxido de cerio con textura controlada para aplicaciones en la generación de hidrógeno, Inti Zumeta-Dubé <sup>1</sup> , José Manuel García Rangel <sup>2</sup> , Gabriela Mariela Reyes Chaparro <sup>2</sup> , Mario Fidel García Sánchez <sup>2,*</sup> .....	48
Martes 07 Análisis de inhomogeneidad en celdas solares de perovskitas a través de fotoluminescencia resuelta a diferentes profundidades ópticas, E. Regalado-Pérez <sup>*a</sup> , E. B Díaz-Cruz <sup>a</sup> , J. Landa-Bautista <sup>a</sup> , N. R. Mathews <sup>a</sup> , X. Mathew <sup>*a</sup> .....	49
Martes 08 Desarrollo de celdas solares del tipo CdTe con una ventana libre de cadmio, Uziel Galarza-Gutiérrez <sup>1</sup> , M. Lourdes Albor-Aguilera <sup>1*</sup> , Miguel A. González-Trujillo <sup>2</sup> , José Manuel Flores Márquez <sup>3</sup> , César Hernández Vásquez <sup>2</sup> , Rogelio Mendoza Pérez <sup>4</sup> .....	50
Martes 09 Síntesis de nanopartículas Cd <sub>x</sub> Se <sub>1-x</sub> partiendo del depósito de bicapas CdS/CdSe usando la técnica de baño químico para aplicaciones de celdas solares, Fernando Javier Sánchez-Rodríguez <sup>a,*</sup> Antonio Arce-Plaza <sup>b</sup> , Osvaldo Vigil-Galan <sup>c</sup> , Cristo M. Yee <sup>c</sup> , Maykel Courel <sup>d</sup> .....	51
Martes 10 Evaluación del Cd <sub>1-x</sub> Zn <sub>x</sub> S como capa transportadora de electrones para estructuras n-i-p en celdas de Sb <sub>2</sub> Se <sub>3</sub> , F Ayala-Mato <sup>1</sup> , O Vigil-Galán <sup>2</sup> , D Seuret-Jiménez <sup>1</sup> , Maykel Courel <sup>3</sup> and Susana Fernández <sup>4</sup> .....	52
Mie 01 10:00-11:00 Next generation technologies for transparent Photovoltaics, Alejandro Pérez-Rodríguez <sup>1,2</sup> , Edgardo Saucedo <sup>3</sup> , Víctor Izquierdo-Roca <sup>1</sup> .....	53
Mie 02 11:00-11:30 Fonones polaritónicos en agujeros estrechos rellenos con un material polar en régimen de acoplamiento ultra fuerte, Fernando de León Pérez .....	55
Mie 03 11:30-12:00 Transferencia Radiativa de Calor en Medios Porosos Deformados, Jaime E. Pérez-Rodríguez, Angela Camacho de la Rosa y Raúl Esquivel Sirvent .....	56
Mie 04 12:00-12:30 Caos autónomo en un dímero polaritónico, Ricardo Ruiz Sánchez, Raúl Rechtman, Yuri G. Rubo .....	57
Mie 05 12:30-13:00 Biased gap edges in quantum-topological multilayers, Guilherme Sipahi <sup>a</sup> , Tiago de Campos <sup>a</sup> , Marcel Alejandro Toloza-Sandoval <sup>b</sup> y L. Diago-Cisneros <sup>acd*</sup> .....	58
TÍTULOS Y RESÚMENES DE LAS CHARLAS PUESTAS EN LA NUBE.....	60
COVID 19: no solo el tamaño importa (scaling), Oscar Sotolongo Costa .....	62
¿Por qué la bicapa de grafeno es un material termoeléctrico?, J.A. Briones-Torres <sup>1</sup> , R. Pérez-Álvarez <sup>1,2</sup> , S. Molina-Valdovinos <sup>1</sup> , I. Rodríguez Vargas <sup>1</sup> .....	63
Propagación de ondas transversalmente polarizadas en laminados piezocompuestos considerando contacto imperfecto en las interfaces, Joanka Hernández Cabanas, José Antonio Otero Hernández y Guillermo Monsivais Galindo .....	64
Effect of [Cu]/[Sb] ratio on the physical properties of CuSbS <sub>2</sub> thin films developed from thermally evaporated CuS/Sb <sub>2</sub> S <sub>3</sub> stack, R .G. Sotelo Marquina <sup>a, b</sup> , T. G. Sánchez <sup>b</sup> , E. Regalado-Perez <sup>b</sup> , N.R Mathews <sup>b</sup> , Joel Pantoja Enríquez <sup>a</sup> , X. Mathew <sup>b*</sup> .....	65

Phase pure CuSbS <sub>2</sub> thin films by heat treatment of electrodeposited Sb <sub>2</sub> S <sub>3</sub> /Cu layers, R.G. Avilez García <sup>1</sup> , J. Pantoja <sup>1</sup> , Andrea Cerdán-Pasarán <sup>2</sup> , E. A. Rueda Perez <sup>4</sup> , Mou Pal <sup>3</sup> , N.R. Mathews <sup>4*</sup> .....	66
Electrodeposition of antimony sulfide selenide thin films: effect of the deposition potential, E.A. Rueda Pérez <sup>1</sup> , Andrea Cerdán-Pasarán <sup>2</sup> , R.G. Avilez García <sup>1</sup> , N.R. Mathews <sup>1*</sup> .....	67
Post-deposition thermal processing of Sb <sub>2</sub> S <sub>3</sub> thin films to obtain the solid solution Sb <sub>2</sub> Se <sub>3-x</sub> S <sub>x</sub> , O. Flores-Ventura <sup>1</sup> , Maykel Courel <sup>2</sup> , N. R. Mathews <sup>1</sup> , T.G. Sanchez <sup>3</sup> , X. Mathew <sup>1,*</sup> .....	68
Resultados preliminares para los niveles de impurezas de silicio en GaAs 2D: Un primer estudio de primeros principios, J. C. Martínez-Orozco <sup>1</sup> , J. D. Correa <sup>2</sup> , M. E. Mora-Ramos <sup>3</sup> , C. A. Duque <sup>4</sup> .....	69
Ondas de Calor en medios periódicos multicapa, Angela Camacho de la Rosa, David Becerril, Guadalupe Gómez Farfán y Raúl Esquivel Sirvent.....	70
Excitación indirecta de magnetoexcitones en un metamaterial de metal y pozo cuántico semiconductor vía el efecto magneto-óptico, P. L. Valdés-Negrin <sup>1</sup> , F. Pérez-Rodríguez <sup>1</sup> .....	71
Propiedades estructurales del Solvente Eutéctico Profundo <b>ZnCl<sub>2</sub></b> :ChCl (2:1) a partir de cálculos de primeros principios. Edgar Ivan Valerio Martínez, Josué Mota Morales y Cristy Leonor Azanza Ricardo .....	72
Estudios preliminares de la influencia de la tensión en los niveles de energía en puntos cuánticos core-shell y core-shell-shell II-VI, K. A. Rodríguez-Magdaleno <sup>a</sup> , F. Urgan <sup>b</sup> , R. Pérez Álvarez <sup>c,d</sup> , J. C., Martínez-Orozco <sup>a</sup> .....	73
<i>Zitterbewegung Pseudoespinorial</i> en grafeno monocapa, Eduardo Javier Serna Duarte, Rolando Pérez Álvarez, Leovildo Diago Cisneros .....	74
Tutorial: Groups, Representations and Homomorphisms: a birds-eye view on Symmetries in Condensed Matter, Guilherme Sipahi .....	76
De la Nanotecnología a los nano robots, José Manuel Nieto Jalil, Ricardo Betancourt Riera y Rene Betancourt Riera.....	77
Cómo citar los trabajos de este Taller con el sistema BiBTeX .....	78



### Instituciones organizadoras y patrocinadoras

1. Centro Latinoamericano de Física (CLAF)
2. Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM)
3. Universidad Autónoma de Zacatecas (UAZ)
4. Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey, Campus Estado de México (ITESM)
5. Instituto Politécnico Nacional (IPN)
6. Universidad de Guadalajara (UdG)

### Comité Organizador

1. Dr. Rolando Pérez Álvarez (UAEM)
2. Ing. Marco A. Huerta Moncada (UAEM)
3. Dr. Osvaldo Vigil Galán (IPN)
4. Dr. Maykel Courel Piedrahita (UdG)
5. Dr. José Antonio Otero Hernández (ITESM)
6. Dr. Juan Carlos Martínez Orozco (UAZ)

### Algunos datos de carácter organizativo

1. El Décimo Cuarto *Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular* tendrá lugar el lunes 28, martes 29 y miércoles 30 de septiembre de 2020.
2. Dada la situación sanitaria en que vivimos, este Taller se efectuará enteramente por vías telemáticas.
3. En el programa que se publica en el sitio web se encuentran las ligas para las distintas sesiones.
4. Además de las conferencias en línea, tendremos la opción de poner charlas en la nube. Éstas estarán a disposición de todo aquel que tenga la liga durante una semana posterior al Taller, o sea hasta el miércoles 7 de octubre.
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*". 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.
6. Éstas y otras informaciones pueden verse en nuestra página web: <http://www.fc.uaem.mx/~tallerfmcm/>
7. **Exhortamos a todos los participantes a contribuir al cumplimiento del horario.**





## Programa

### LUNES 28 DE SEPTIEMBRE. MAÑANA. Presiden la sesión Isaac Rodríguez Vargas y Leovildo Diago Cisneros

Horario	Título	Autores
10:00-10:10	Inauguración	
10:10-11:00	Applications of hard X-ray nanoprobes in materials science	Gema Martínez Criado
11:00-11:30	Estudio computacional de interfaces $\text{Cu}_2\text{O}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ en celdas solares de perovskita.	Eduardo Menéndez-Proupin, Jesús E. Castellanos-Águila, Lucas Lodeiro, Ana L. Montero-Alejo, Pablo Palacios, José C. Conesa, Perla Wahnón
11:30-12:00	Estudios benchmark ab initio de los estados de campo de ligando $^2\Sigma_g^+$ , $^2\Pi_g$ y $^2\Delta_g$ de $\text{AgI}_2$ incluyendo los efectos spín-órbita	Alejandro Ramírez Solís
12:00-12:30	Flat bands beyond twisted bilayer graphene.	Eric Suárez Morell
12:30-13:00	Stability, ultrastability and charge distribution in silver, gold and bimetallic clusters: the $\text{ag}_{44-x}\text{au}_x(\text{sr})^4$ and $\text{ag}_{25-x}\text{au}_x(\text{sr})_{18}^{1-}$ cases	<u>C. Morera-Boado</u> , F. Hidalgo and C. Noguez
13:00-15:00	RECESO	

### LUNES 28 DE SEPTIEMBRE. TARDE. Presiden la sesión Outmane Oubram y Karla Arely Rodríguez Magdalena

Horario	Título	Autores
13:00-15:00	RECESO	
15:00-15:30	Análisis de un modelo unidimensional de PCM	Rubén Dario Santiago, Ernesto Manuel Hernández Cooper, Rolando Pérez Alvarez y José Antonio Otero Hernández
15:30-16:00	Efectos de tamaño finito de la zona de difusión en la estimación de los coeficientes efectivos de difusión durante la nitruración gaseosa de hierro puro	<u>Ernesto M. Hernández</u> , Rubén D. Santiago, Francisco Castillo, Joaquín Oseguera, Dulce Melo, José A. Otero
16:00-16:30	Estimación de la línea de saturación líquido-sólido en un fluido de esferas suaves mediante un muestreo sesgado en el parámetro de orden de Steinhardt	<u>Diego López Bernal</u> , Ernesto Hernández Cooper, José A. Otero
16:30-17:00	Estimación de propiedades macroscópicas de materiales elásticos heterogéneos	<u>R. Rodríguez Ramos</u> , Mónica Tapia Gaspar, José A. Otero
17:00-17:30	Cálculo de propiedades efectivas en compuestos visco-elásticos fibrosos	Raúl Martínez-Rosado, José A. Otero, Reinaldo Rodríguez Ramos
17:30-18:00	Propiedades de la transmisión cuántica para las estructuras multibarrera de Cantor, subCantor y subCantor simétrico	Dan Sidney Díaz Guerrero
18:00-18:30	Two lane traffic flow with moving and fixed defect	Noureddine Lakouari, Julio César Pérez-Sansalvador, Jesús Garcia-Diaz and Saúl E. Pomares Hernández

**MARTES 29 DE SEPTIEMBRE. MAÑANA. Preside la sesión Ernesto Manuel Hernández Cooper**

Horario	Título	Autores
10:00-10:30	Anomalous energy flow in passive elastic layers with exceptional points	Gal Shmuel, Ben Lustig, Guy Elbaz, Alan Muhafra
10:30-11:00	Optoelectronic properties of exciton trapped by a donor impurity in a single spherical quantum dot	E. Feddi
11:00-11:30	Excitons in spherical colloidal quantum dots	<u>R. L. Restrepo</u> , Walter Ospina-Muñoz, E. Feddi, M. E. Mora-Ramos, J. A. Vinasco, A. L. Morales and C. A. Duque
11:30-12:00	Efecto Berreman en metamateriales bimetálicos	F. Pérez-Rodríguez, S. Cortés-López, S.L. Gastélum-Acuña, F.J. Flores-Ruiz, V. Garcia-Vazquez, R. García-Llamas
12:00-12:30	Polarímetro de estado sólido de un sólo disparo basado en GaAsN	Alejandro Kunold
12:30-13:00	Estructura electrónica de sistemas con pozos cuánticos delta-dopados múltiples	Humberto Noverola Gamas, Outmane Oubram, Luis Manuel Gaggero Sager
13:00-15:00	RECESO	

**MARTES 29 DE SEPTIEMBRE. TARDE. Preside la sesión Juan Carlos Martínez Orozco**

Horario	Título	Autores
13:00-15:00	RECESO	
15:00-16:00	Diseño de nanocomplejos teranósticos para la entrega dirigida de medicamentos, terapia fotodinámica y terapia fototérmica contra cáncer de mama HER2+	Elder De la Rosa, Gonzalo Ramirez, Sandeep Panikar, Pedro Salas, Tanya Camacho
16:00-16:30	Comportamiento de heteroestructuras 2D G/hBN al variar la distancia entre capas	R. M. Torres-Rojas, D. A. Contreras-Solorio, L. Hernández and A. Enciso
16:30-17:00	Effects of disorder on the transport and thermoelectric properties of silicene superlattices	O.Oubram, O.Navarro, E.J.Guzmán, I.Rodríguez-Vargas
17:00-17:30	Efectos termoeléctricos en superredes aperiódicas basadas en grafeno	Sergio Molina Valdovinos, Eric J. Guzman, I. Rodriguez-Vargas
17:30-18:00	Self-similar transport, spin polarization and thermoelectricity in complex silicene structures	<u>R. Rodríguez-González</u> , L. M. Gaggero-Sager and I. Rodríguez-Vargas
18:00-18:30	Extracción de características de polvo en módulo fotovoltaico mediante espectro de singularidades	Seuret-Jiménez Diego, Trutié-Carrero Eduardo

## MARTES 29 DE SEPTIEMBRE. SESIÓN DE FENÓMENOS FOTOVOLTAICOS.

Presiden la sesión Osvaldo Vigil Galán y Maykel Courel Piedrahita

Horario	Título	Autores
10:00 – 11:00	Status and perspectives of emerging thin film photovoltaic inorganic materials	Z. Jehl, J. Puigdollers, M. Placidi, S. Giraldo, K. Tiwari, E. Saucedo
11:00 – 11:30	The effect of Se/(S+Se) compositional ratios on the performance of SnS-based solar cell: a numerical simulation	Isaac Montoya De Los Santos, Hugo J. Cortina-Marrero, L. Hechavarría-Difur, F. J. Sánchez-Rodríguez, C. A. Meza-Avendaño, J. A. Borrego-Pérez, Víctor I. Moreno-Oliva, Edwin Román-Hernández, Maykel Courel
11:30 – 12:00	Semiconductor thin films for energy conversion	P. K. Nair
12:00-12:30	RECESO	
12:30 – 13:00	Estado actual y perspectivas de nuevas celdas solares emergentes basadas en calcogenuros de antimonio	Osvaldo Vigil Galán
13:00 – 13:30	Celdas solares reducidas en cadmio	M.L. Albor-Aguilera, U. Galarza-Gutierrez, J.A. Ortega Cárdenas, C. Hernandez Vasquez, M.A. GonzálezTrujillo
13:30 – 14:00	Películas de óxido de cerio con textura controlada para aplicaciones en la generación de hidrógeno	Inti Zumeta-Dubé, José Manuel García Rangel, Gabriela Mariela Reyes Chaparro, Mario Fidel García Sánchez
14:00-16:00	RECESO	
16:00 – 16:30	Análisis de inhomogeneidad en celdas solares de perovskitas a través de fotoluminescencia resuelta a diferentes profundidades ópticas	E. Regalado-Pérez, E. B Díaz-Cruz, J. Landa-Bautista, N. R. Mathews, X. Mathew
16:30 – 17:00	Desarrollo de celdas solares del tipo CdTe con una ventana libre de cadmio.	Uziel Galarza-Gutiérrez, M. Lourdes Albor-Aguilera, Miguel A. González-Trujillo, José Manuel Flores Márquez, César Hernández Vásquez, Rogelio Mendoza Pérez
17:00 – 17:30	Síntesis de nanopartículas $CdS_xSe_{1-x}$ iniciando de las bicapas CdS/CdSe usando la técnica de baño químico para aplicaciones de celdas solares	Fernando Javier Sánchez-Rodríguez, Antonio Arce-Plaza, Osvaldo Vigil-Galan, Cristo M. Yee, Maykel Courel
17:30 – 18:00	Evaluación del $Cd_{1-x}Zn_xS$ como capa transportadora de electrones para estructuras n-i-p en celdas de $Sb_2Se_3$	F Ayala-Mato, O Vigil-Galán, D Seuret-Jiménez, Maykel Courel and Susana Fernández

## MIÉRCOLES 30 DE SEPTIEMBRE Preside la sesión Rolando Pérez Álvarez

Horario	Título	Autores
10:00-11:00	Next generation technologies for transparent Photovoltaics	Alejandro Pérez Rodríguez
11:00-11:30	Fonones polaritónicos en agujeros estrechos rellenos con un material polar en régimen de acoplamiento ultra fuerte	Fernando de León Pérez
11:30-12:00	Transferencia Radiativa de Calor en Medios Porosos Deformados	Jaime E. Pérez-Rodríguez, Angela Camacho de la Rosa y <u>Raúl Esquivel Sirvent</u>
12:00-12:30	Caos autónomo en un dímero polaritónico	<u>Ricardo Ruiz Sánchez</u> , Raúl Rechtman, Yuri G. Rubo
12:30-13:00	Biased gap edges in quantum-topological multilayers	Guilherme Sipahi, Tiago de Campos, Marcel Alejandro Toloza-Sandoval y L. Diago-Cisneros
13:00-13:10	Clausura	

## **TÍTULOS Y RESÚMENES DE LAS CONFERENCIAS EN LÍNEA**



**Lun01 10:10-11:00 Applications of hard X-ray nanoprobes in materials science,  
Gema Martínez Criado**

ICMM-CSIC-España

Owing to the spatial resolution and sensitivity (i.e., signal to background ratio), X-ray nanobeams are promising tools with a strong impact in nanoscience. Although the optical quality of the X-ray focusing optics has limited the progress of hard X-ray nanoprobes, recent progresses in fabrication approaches have pushed the spatial resolution towards the diffraction limit. Consequently, the exploitation of X-ray nanobeams has begun to extend towards the atomic domain, with concomitant and continuous developments of multiple analytical techniques. The study of nanoscale objects, small embedded nanodomains with weak signals and/or heterogeneous nanostructures has demanded the use of intense X-ray pencil beams. In addition, the great brilliance with reduced emittance of current third generation synchrotron sources and novel X-ray detection schemes have boosted nowadays intense X-ray nanobeams using several focusing devices. Due to the multiple interactions of X-rays with matter these X-ray nanoprobes present manifold capacities, such as ultra-sensitive elemental/chemical detection by X-ray fluorescence/X-ray absorption, or identification of minority polytypes, and/or strain fields by X-ray diffraction with nanometer resolution. In the present talk I describe how hard X-ray nanobeams are produced and exploited currently for space-resolved determination of structural and electronic properties, as well as for chemical speciation of nanosized materials. Selected recent examples will range from phase separation in single nanowires to visualization of inversion domains and buried interfacial defects, to structural distortions and quantum confinement effects.



**Lun 02 11:00-11:30 Estudio computacional de interfaces  $\text{Cu}_2\text{O}/\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  en celdas solares de perovskita, Eduardo Menéndez-Proupin<sup>1\*</sup>, Jesús E. Castellanos-Águila<sup>2</sup>, Lucas Lodeiro<sup>1</sup>, Ana L. Montero-Alejo<sup>3</sup>, Pablo Palacios<sup>4</sup>, José C. Conesa<sup>5</sup>, Perla Wahnón<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Universidad de Chile, Chile

<sup>2</sup>Universidad de Guanajuato, México

<sup>3</sup>Universidad Tecnológica Metropolitana, Chile

<sup>4</sup>Universidad Politécnica de Madrid, España

<sup>5</sup>Instituto de Catálisis y Petroleoquímica, CSIC, España

\* Autor de correspondencia: [emenendez@uchile.cl](mailto:emenendez@uchile.cl)

Se presenta un estudio de los estados electrónicos en las superficies de perovskita yoduro de plomo metilamonio ( $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$ ), y sus interfaces con el óxido cuproso ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ), el cual se ha usado como capa de transporte de huecos en las celdas solares de perovskita. Investigamos la alineación de las bandas y los posibles estados de la interfaz. Hemos diseñado modelos tipo *slab* de las superficies e interfaces que son paralelas a los planos cristalográficos (001) de ambos materiales. Los modelos se diferencian entre ellos por los planos atómicos fronterizos.  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{PbI}_3$  (001) puede terminarse en planos con la composición  $\text{PbI}_2$  o  $\text{CH}_3\text{NH}_3\text{I}$ , mientras que  $\text{Cu}_2\text{O}$ (001) puede terminarse en planos de oxígeno o cobre. se encuentra En los cuatro modelos de interfaz considerados se encuentra una alineación de las bandas que favorece la conversión fotovoltaica, con indicios de que la terminación  $\text{PbI}_2$  permite mayor eficiencia de fotoconversión. <https://arxiv.org/abs/2006.15161>

**Lun 03 11:30-12:00 Estudios benchmark ab initio de los estados de campo de ligando  $2\Sigma_g^+$ ,  $2\Pi_g$  y  $2\Delta_g$  de  $AgI_2$  incluyendo los efectos espín-órbita, Alejandro Ramírez Solís**

**Centro de Investigación en Ciencias, UAEM.**

Se reportan cálculos *ab initio* CASSCF+ACPF tipo benchmark para estudiar los tres estados de campo de ligando ( $2\Sigma_g^+$ ,  $2\Pi_g$ ,  $2\Delta_g$ ) de  $AgI_2$ . Se incluyen los efectos espín-órbita de ambos átomos a través del hamiltoniano efectivo  $H_{so}$  en la base de los estados  $|\Lambda S \Sigma\rangle$  puramente electrónicos utilizando los pseudopotenciales escalares relativistas de Stuttgart-Köln [1]. El estado base tiene geometría centrosimétrica lineal y resulta ser  $2\Pi_g$ , en contradicción con la teoría de campo de ligando.

Las energías de transición  $2\Pi_g - 2\Sigma_g^+$  y  $2\Pi_g - 2\Delta_g$  adiabáticas a nivel ACPF son 7344 y 26085  $cm^{-1}$ , respectivamente. La comparación de los resultados actuales con los obtenidos previamente para  $AgCl_2$  y  $AgBr_2$  [2,3] muestra un incremento monótono de las energías de transición  $2\Pi_g - 2\Sigma_g^+$  y  $2\Pi_g - 2\Delta_g$  debido a una menor participación de las estructuras iónicas en las funciones de onda CASSCF conforme aumenta el número atómico del halógeno.

Cuando se incluyen los efectos spin-órbita solamente el primero y segundo estados excitados son mezclas de estados  $|\Lambda S \Sigma\rangle$  puros. Se obtienen cinco estados de estructura fina doblemente degenerados en la geometría de equilibrio del estado base como sigue: estado base  $\Omega=3/2$  ( $2\Pi_g$ ), estado A  $\Omega=1/2$  (83%  $2\Pi_g$ +17%  $2\Sigma_g^+$ ), estado B  $\Omega=1/2$  (17%  $2\Pi_g$ + 83%  $2\Sigma_g^+$ ), estado C  $\Omega=5/2$  ( $2\Delta_g$ ) y el estado D  $\Omega=3/2$  ( $2\Delta_g$ ).

[1] A. Ramírez-Solís. J. Molec. Spectr. 373 (2020) 111355.

[2] A. Ramírez-Solís, R. Poteau, JP Daudey. J. Chem. Phys. 124 (2006) 34307.

[3] A. Ramírez-Solís, I. Santoyo. J. Molec. Spectr. 263 (2010) 162.

**Lun 04 12:00-12:30 Flat bands beyond twisted bilayer graphene, Eric Suárez Morell**

Dpto de Física. Universidad Técnica Federico Santa María, Valparaíso, Chile

The interest in twisted bilayer graphene (TBG), which was initially motivated by its intriguing properties[1] have recently been boosted by the discovery of superconductivity[2] for angles close to 1 degree. A long range moiré potential confines the electronic states at the Fermi level in AA-stacked regions, thus suppressing their group velocity, which drops to zero at certain magic angles[3-4].

I show two more structures where flat bands near the Fermi level are also present. One of them is a twisted double bilayer graphene (TDBG), composed of two AB-stacked bilayers of graphene with a rotation between them. The second is a collapsed chiral carbon nanotube.

The first system has recently been the focus of a few experimental and theoretical works[5-7]. We find by density functional theory (DFT) calculations that TDBG has a 40 meV gap at the K point of the Brillouin zone for large angles, which decreases for decreasing angles. We explain the origin of this dependence based on DFT and Tight Binding Calculations[8].

The other structure is a chiral carbon nanotube that suffers a compression and keeps the collapsed geometry[9]. Resorting to a combination of approaches, namely, molecular dynamics to obtain the relaxed geometries and tight-binding calculations validated against ab initio modeling, we find that magic angle physics occur in collapsed carbon nanotubes. The bands structure of this quasi-1D structure are also flat near the fermi level confined in an energy window smaller than in TBG, that suggest that this system might display strong correlated effects.

[1] J. M. B. Lopes dos Santos, et al, Phys. Rev. Lett. 99 , 256802 (2007).

[2] Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, Nature 556, 43 (2018).

[3] E. Suárez Morell, J. D. Correa, P. Vargas, M. Pacheco, and Z. Barticevic, Phys. Rev. B 82 , 121407 (2010).

[4] R. Bistritzer and A. H. MacDonald, PNAS 108 , 12233 (2011).

[5] Y. W. Choi and H. J. Choi, 1, 1 (2019), arXiv:1903.00852

[6] X. Liu, Z. Hao, E. Khalaf, J. Yeon Lee, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Vishwanath, and P. Kim, (2019), arXiv:1903.08130v1.

[7] Y. Cao, D. Rodan-Legrain, O. Rubies-Bigordà, J. M. Park, K. Watanabe, T. Taniguchi, and P. Jarillo-Herrero (2019), arXiv:1903.08596.

[8] F. J. Culchac, R. R. Del Grande, Rodrigo B. Capaz, Leonor Chico and E. Suárez Morell. Nanoscale, 2020,12, 5014-5020

[9] Olga Arroyo-Gascón, Ricardo Fernández-Perea, Eric Suárez Morell, Carlos Cabrillo, and Leonor Chico. Nanoletters 2020

**Lun 05 12:30-13:00 Stability, ultrastability and charge distribution in silver, gold and bimetallic clusters: the  $\text{Ag}_{44-x}\text{Au}_x(\text{SR})_{30}^{4-}$  and  $\text{Ag}_{25-x}\text{Au}_x(\text{SR})_{18}^{1-}$  cases, C. Morera-Boado<sup>a</sup>, F. Hidalgo<sup>a</sup> and C. Noguez<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Cátedra Conacyt. Centro de Investigaciones Químicas. Universidad Autónoma de Morelos. Avenida Universidad 1001, Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos.

<sup>b</sup>Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364, México D. F. 01000, México.

Metal nanoparticles have shown a substantial impact across a wide range of fields such as catalysis, optoelectronics, sensing, photochemistry, energy conversion and medicine. Among them, ligand protected Au-nanoparticles have been more studied due to its stability and high affinity to the thiol group, which is present in many different organic molecules. On the other hand, silver nanoparticles are known to be less noble than their gold analogues<sup>1-3</sup>. Clusters with different number of Au atoms capped with the same ligand have been found, whereas silver clusters have a much more constrained relationship between size and ligand<sup>2,4</sup>. One of the main characteristics of these ligand protected metal nanoparticles is their ultrastability, recently observed in silver-protected clusters<sup>5</sup>. Although the outstanding stability of these nanoparticles is attributed to the fulfillment of a closed-shell electron configuration rule with large HOMO-LUMO gaps, the key factors causing its ultrastability are still unclear<sup>6</sup>. Therefore, to gain some insights on the ultrastability in these metallic clusters, in this work the atomic configurations and charge distributions of  $\text{Ag}_{44-x}\text{Au}_x\text{SR}_{30}^{4-}$  and  $\text{Ag}_{25-x}\text{Au}_x\text{SR}_{18}^{1-}$  with R= -H, -CH<sub>3</sub> and -C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> have been analyzed by means of DFT<sup>7</sup>. Substituting silver atoms in the core of  $\text{Ag}_{44}\text{SR}_{30}^{4-}$  by gold atoms, the stability is increased, observing a clear tendency between large adsorption energies and large HOMO-LUMO gaps. The analysis of charge distributions of silver, gold and different bimetallic clusters help us to understand where the negative charge is located and how this distribution affects their relative stabilities. Thus, the origin of the ultrastabilities of these clusters, the possibility of the existence of different ligand configurations, the charge distribution and the role of the -SR ligands in their stabilities are discussed in this talk.

1. K. M. Harkness, Y. Tang, A. Dass, J. Pan, N. Kothalawala, V. J. Reddy, D. E. Cliffler, B. Demeler, F. Stellacci, O. M. Bakr and John A. McLean. *Nanoscale*, **2012**, 4, 4269.
2. P. E. Laibinis, G. M. Whitesides, D. L. Allara, Y. T. Tao, A. N. Parikh and R. G. Nuzzo. *J. Am. Chem. Soc.*, **1991**, 113, 7152.
3. C.P. Joshi, M. S. Bootharaju, M. J. Alhilaly, and O. M. Bakr. *J. Am. Chem. Soc.* **2015**, 137, 11578.
4. O.M. Bakr, V. Amendola, C.M. Aikens, W. Wenseleers, R. Li, L. Dal Negro, G.C. Schatz, F. Stellacci. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2009**, 121, 6035.
5. A. Desireddy, B. E. Conn, J. Guo, B. Yoon, R. N. Barnett, B. M. Monahan, K. Kirschbaum, W. P. Griffith, R. L. Whetten, U. Landman and T. P. Bigioni. *Nature*, **2013**, 501, 399.
6. H. Hakkinen, *Chem. Soc. Rev.*, **2008**, 37, 1847.
7. C. Morera-Boado, F. Hidalgo and C. Noguez. *J. Phys. Chem. C* **2019**, 123, 43, 26633–26643

**Lun 06 15:00-15:30 Análisis de un modelo unidimensional de PCM, Rubén Dario  
Santiago, Ernesto Manuel Hernández Cooper, Rolando Pérez Alvarez y José  
Antonio Otero Hernández**

Los materiales de cambio de fase (PCM) son atractivos desde diferentes puntos de vista ya que pueden usar el calor latente para almacenar y liberar energía térmica en varias aplicaciones (aislamiento térmico, refrigeración, almacenamiento de energía térmica). Recientemente, la investigación sobre PCM está dirigida a mejorar y analizar sus propiedades termofísicas. La conductividad térmica, el calor de fusión latente y la temperatura de saturación se encuentran entre las propiedades que tienen un mayor impacto en el rendimiento térmico de los PCM. Los aspectos más importantes que se pueden usar para describir el comportamiento dinámico de los PCM están relacionados con la ecuación de calor y el balance de masa de energía en la interfase o la ecuación de Stefan. Existen varios métodos numéricos y analíticos que permiten analizar el comportamiento dinámico de la transición de fase en un PCM, como por ejemplo: el método de diferencias finitas (FDM), el método integral de equilibrio térmico (HBIM) y una aproximación basada en series de Fourier complejas (FSM).

En este trabajo se propone un modelo unidimensional de PCM líquido-sólido, donde se incorporan diferentes aspectos físicos de manera fundamental: condiciones de frontera isotérmicas y adiabáticas, conservación de masa, la incorporación de la expansión térmica a través de la conservación de la masa total y el efecto de la formación de varios frentes debido a la oscilación periódica de la temperatura ambiental alrededor del punto de fusión. Se comparan los resultados obtenidos para varios casos utilizando los métodos FDM, HBIM y FSM.

**Lun 07 15:30-16:00 Efectos de tamaño finito de la zona de difusión en la estimación de los coeficientes efectivos de difusión durante la nitruración gaseosa de hierro puro, Ernesto M. Hernández, Rubén D. Santiago, Francisco Castillo, Joaquín Oseguera, Dulce Melo, José A. Otero**

Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México.  
EM CP 52926 Atizapán de Zaragoza, México.

E-mails: [emcooper@tec.mx](mailto:emcooper@tec.mx) , [ruben.dario@tec.mx](mailto:ruben.dario@tec.mx), [francast@tec.mx](mailto:francast@tec.mx), [joseguer@tec.mx](mailto:joseguer@tec.mx),  
[virimelo@tec.mx](mailto:virimelo@tec.mx), [j.a.otero@tec.mx](mailto:j.a.otero@tec.mx)

La medición experimental de la dinámica de las capas  $\varepsilon$  y  $\gamma$  durante la nitruración gaseosa de una muestra de hierro puro, ha sido utilizada para obtener los coeficientes de difusión del nitrógeno a través de un balance de masa en cada capa, originalmente propuesto por Somers et. al. En este trabajo se muestra que las ecuaciones de movimiento originalmente propuestas por Somers y posteriormente utilizadas por otros autores, pueden producir errores en la estimación de los coeficientes de difusión al no considerar los efectos de tamaño y velocidad de crecimiento finitos en la zona de difusión. En este trabajo, se obtienen ecuaciones de movimiento basadas en un balance de masa total que permite describir la dinámica del crecimiento de la zona de difusión. Contrario a lo que se asume en la literatura, el modelo propuesto predice en general un comportamiento no parabólico en la dinámica de cada capa. La ecuación de movimiento para la zona de difusión, que resulta del balance de masa total, permite estimar correcciones de tamaño finito en los coeficientes efectivos de difusión  $D_\varepsilon$ ,  $D_\gamma$  y  $D_\alpha$  reportados por otros autores. Finalmente, la estimación de estas correcciones se obtuvo mediante dos procesos de minimización del error cuadrático, entre los datos experimentales de espesores y masa total de la muestra, y las soluciones obtenidas mediante las ecuaciones de movimiento propuestas.

**Lun 08 16:00-16:30 Estimación de la línea de saturación líquido-sólido en un fluido de esferas suaves mediante un muestreo sesgado en el parámetro de orden de Steinhardt, Diego López Bernal, Ernesto Hernández Cooper, José A. Otero**

Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México.  
EM CP 52926 Atizapán de Zaragoza, México.

E-mails: [A01332642@itesm.mx](mailto:A01332642@itesm.mx), [emcooper@tec.mx](mailto:emcooper@tec.mx), [j.a.otero@tec.mx](mailto:j.a.otero@tec.mx)

La temperatura de saturación líquido-sólido en un fluido de esferas suaves ha sido determinada por varios autores mediante el salto en la entalpía cerca del punto de transición utilizando un parámetro de orden local de tipo Steinhardt, para identificar la formación de sólido en el equilibrio termodinámico o mediante una apreciación cualitativa en las funciones radiales de distribución. En este trabajo se obtiene la temperatura de fusión y la entalpía de formación a través del salto en el parámetro de orden global de Steinhardt  $Q_6$  como función de la temperatura. El método consiste en sesgar el muestreo con un valor elevado de  $Q_6$  en un ensamble NPT, hasta llegar al equilibrio termodinámico y después realizar un muestreo de Boltzmann sobre las configuraciones resultantes para observar el comportamiento de  $Q_6$  una vez que se alcanza el equilibrio termodinámico. El salto en el parámetro de orden como función de la temperatura puede observarse claramente a distintas presiones, determinando de forma menos ambigua, la temperatura de fusión del fluido.

**Lun 09 16:30-17:00 Estimación de propiedades macroscópicas de materiales elásticos heterogéneos, R. Rodríguez Ramos<sup>1</sup>, Mónica Tapia Gaspar<sup>2</sup>, José A. Otero<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Facultad de Matemática y Computación, Universidad de la Habana, San Lázaro y L, Vedado, Habana 4, CP-10400, Cuba & Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Puebla Atlixcáyotl 5718, Reserva Territorial Atlixcáyotl, 72453 Puebla, México

<sup>2</sup>Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México, EM CP 52926 Atizapán de Zaragoza, México.

E-mails: [reinaldo@matcom.uh.cu](mailto:reinaldo@matcom.uh.cu), [A01377986@itesm.mx](mailto:A01377986@itesm.mx), [j.a.otero@tec.mx](mailto:j.a.otero@tec.mx)

Propiedades efectivas de materiales compuestos son estimadas mediante métodos de homogeneización. En particular, en el presente trabajo, se utiliza la aproximación de Maxwell y/o el método de homogeneización asintótica para obtener expresiones semi-analíticas en estructuras heterogéneas, como, por ejemplo, estructuras formadas por dos fases: una fase llamada matriz y la otra el refuerzo que puede ser inclusiones de tipo esferoidales, elipsoidales hasta llegar a tener la forma de fibras alargadas alineadas aleatoriamente. Se muestran resultados numéricos y comparaciones con otras teorías matemáticas para indicar la efectividad de los resultados.

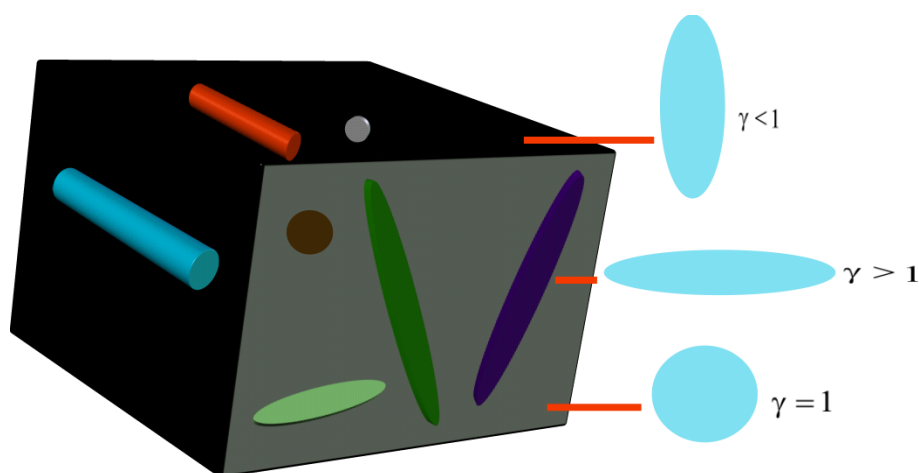


Figura 1 – Muestra de una estructura heterogénea: la matriz en color gris y las inclusiones en otro color.



**Lun 10 17:00-17:30 Cálculo de propiedades efectivas en compuestos visco-elásticos fibrosos, Raúl Martínez-Rosado, José A. Otero, Reinaldo Rodríguez Ramos**

Se considera un compuesto visco-elástico reforzado con fibras. Las fibras se distribuyen periódicamente a lo largo de las dos direcciones perpendiculares a la orientación de las fibras. Se estudiarán casos de celdas cuadradas y celdas hexagonales. En el compuesto visco-elástico las propiedades materiales dependen del tiempo; por lo cual, se estudian las propiedades efectivas en función del tiempo. Escogeremos en nuestro estudio el modelo visco-elástico de Series de Prony. Los seis problemas locales obtenidos de la aplicación del Método de Homogeneización Asintótica son resueltos utilizando el Método de Elemento Finito. Esta combinación de métodos le llamamos Método Semi-analítico para calcular propiedades efectivas. Se presentan resultados numéricos para las propiedades efectivas y se compararan con fórmulas cerradas.

**Lun 11 17:30-18:00 Propiedades de la transmisión cuántica para las estructuras multibarrera de Cantor, subCantor y subCantor simétrico, Dr. Dan Sidney Díaz Guerrero**

Las estructuras multibarrera basadas en fractales han sido de interés sostenido para la comunidad científica por al menos los últimos 30 años. Sin embargo, el hallazgo de propiedades específicas de cada estructura eludió durante más de una década a la comunidad enfocada en estudiarlas. No obstante, en los pasados cinco años se propuso una variante de la estructura tipo Cantor, llamada subCantor<sup>1</sup>. Esta estructura y su correspondiente estructura simétrica<sup>2</sup> poseen algunos rasgos entre sus curvas de transmisión que las distinguen<sup>3,4,5</sup>.

En esta plática se presentarán las curvas de transmisión de estos sistemas que distinguen a las estructuras subCantor y subCantor simétrico y se describirá una comparación estructural con las estructuras tipo Cantor tradicionales. En particular se hará énfasis en las diferencias entre las propiedades estructurales y cuales de éstas dan lugar a curvas de transmisión que permiten distinguirlas. Finalmente se revisarán algunas perspectivas e investigaciones en proceso.

**Bibliografía:**

1. Scaling behavior in the transmission coefficient for a self-affine multi-barrier system using Graphene. D. S. Díaz-Guerrero, L. M. Gaggero-Sager, I. Rodríguez-Vargas and O. Sotolongo-Costa. EPL, 111 (2015) 57006
2. Self-similar charge transmission in gapped Graphene. D. S. Díaz-Guerrero, I. Rodríguez-Vargas, G. G. Naumis And L. M. Gaggero-Sager. Fractals, Vol. 24, No. 2 (2016) 1630002
3. Self-similar transmission properties of aperiodic Cantor potentials in gapped Graphene. Rogelio Rodríguez-González, Isaac Rodríguez-Vargas, Dan Sidney Díaz-Guerrero, and Luis Manuel Gaggero-Sager. Eur. Phys. J. B (2016) 89: 17
4. Self-similar conductance patterns in graphene Cantor-like structures. H. García-Cervantes, L. M. Gaggero-Sager, D. S. Díaz-Guerrero, O. Sotolongo-Costa & I. Rodríguez-Vargas. Scientific Reports 7 (2017) 617
5. Self-similar transmission patterns induced by magnetic field effects in graphene. R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas, D.S. Díaz-Guerrero, L.M. Gaggero-Sager. Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures 101 (2018) 22–28

**Lun 12 18:00-18:30 Two lane traffic flow with moving and fixed defect,  
Noureddine Lakouari<sup>1,2,\*</sup>, Julio César Pérez-Sansalvador<sup>1,2</sup>, Jesús Garcia-Diaz<sup>1,2</sup>  
and Saúl E. Pomares Hernández<sup>1,3</sup>**

<sup>1</sup>Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica, Santa María Tonantzintla, Puebla  
72840, Mexico.

<sup>2</sup>Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, CDMX 03940, Mexico

<sup>3</sup>CNRS, LAAS, 7 avenue du Colonel Roche, F-31400 Toulouse, France

\*Correspondence: [n.lakouari@inaoep.mx](mailto:n.lakouari@inaoep.mx)

[n.lakouari@gmail.com](mailto:n.lakouari@gmail.com)

Moving defects can hinder fast vehicles to move with their desired speed, thus induce higher dissipation energy and a large emergent moving jam in the system. In addition, fixed defects can reduce the speed of vehicles and increase the probability of car accidents. This study is devoted to shedding light on the difference between the moving and fixed defect and their effect on two-lane traffic. The phases diagram was investigated. In addition, spacetime diagrams were giving in order to understand the microscopic interaction between vehicles. Furthermore, many strategies are discussed to improve the traffic flow situation in the two-lane traffic system with the presence of the two types of defects (i.e. moving and fixed).

**Keywords:** phase diagram, emergent phenomena, two-lane traffic, moving defects, fixed defects.

**Mar 01 10:00-10:30 Anomalous energy flow in passive elastic layers with exceptional points, Gal Shmuel, Ben Lustig, Guy Elbaz, Alan Muhafra**

Faculty of Mechanical Engineering, Technion-Israel Institute of Technology, Haifa  
32000, Israel

Recent interest in metamaterials has led to a renewed study of wave mechanics in the different branches of physics. Elastodynamics involves a special intricacy, owing to the coupling between the volumetric and shear parts of the elastic waves. Through a study of in-plane waves traversing periodic laminates, here we show that this coupling can result with unusual energy flow. Specifically, we find that the corresponding frequency spectrum contains modes which simultaneously attenuate and propagate, and demonstrate that these Bloch modes coalesce to purely propagating modes at exceptional points in the spectrum. These non-Hermitian degeneracies with propagating modes, which to date were realized by balancing energy gain and loss in systems with parity-time symmetry, are reported here in a purely elastic setting. We show that the laminate exhibits metamaterial features near these points, such as negative refraction, and beam steering and splitting. While negative refraction in laminates has been demonstrated before by considering pure shear waves impinging on an interface with multiple layers, here we realize it for coupled waves impinging on a simple single-layer interface. This feature, together with the appearance of exceptional points, are absent from the model problem of anti-plane shear waves which have no volumetric part, and hence from the mathematically identical electromagnetic waves in materials with positive refractive index. Thereby, our work paves the way for future applications such as asymmetric mode switches using a tangible elastic apparatus.

**Mar 02 10:30-11:00 Optoelectronic properties of exciton trapped by a donor impurity in a single spherical quantum dot, E. FEDDI**

**Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials,  
ENSET, Mohammed V University in Rabat, Morocco**

This work is a contribution to the understanding of the optoelectronic properties related to excitonic transitions in spherical semiconductor nanostructures, under different perturbations: presence of an ionized impurity, magnetic field, pressure and temperature. The calculations were carried out in the effective mass approximation framework, and using the Ritz variational method. Based on the compact density matrix approach (CDMA), we determined the effects of the pressure and temperature on the optical responses (absorption coefficients (AC) and refractive indices (RI)) associated to the 1s-1p transition of an exciton in a simple quantum dot. Then we calculated the binding energies and nonlinear optical properties of an exciton in a spherical core/shell quantum dots under the effect of pressure. In the second part, we treated the case of the complex  $(D^+, X)$ , for this purpose we are taking the case of the most probable dissociation process, and we discussed the electron-hole-ionized donor interactions by calculating the binding energies, the localization energies and the diamagnetic shift of this complex in the presence of the magnetic field, under the effect of the host medium of the quantum dot, also the role of the mass ratio in the stability of  $(D^+, X)$  has been investigated. We have completed our study by investigating the optical and magneto-optical properties of  $(D^+, X)$  taking into account the two different dissociations processes. A comparison between the exciton and the complex  $(D^+, X)$  made it possible to understand the role of the ionized donor in the optical responses.

**Keywords** : Spherical quantum dot, Core/shell, Exciton,  $(D^+, X)$  complex, Optoelectronic properties, Binding energies, Transition energies, Optical absorption coefficient, Refractive index change, Pressure, Temperature, magnetic field.

Ce travail est une contribution à la compréhension des propriétés optoélectroniques reliées aux transitions excitoniques sous différentes perturbations : champ magnétique, pression, température et présence d'une impureté dans les nanostructures sphériques. Les calculs ont été réalisés dans le cadre de l'approximation de la masse effective et en utilisant la méthode variationnelle. Après avoir présenté un bref rappel sur les complexes excitoniques dans les semi-conducteurs, nous déterminons les réponses optiques (les coefficients d'absorption et les indices de réfraction) associés à la transition 1s-1p d'un exciton dans une boîte quantique simple sous l'effet de la pression et de la température. Puis nous appliquons ce modèle pour calculer les énergies de liaisons et les propriétés optiques non linéaires d'un exciton dans une boîte quantique sphérique de type cœur/coquille sous l'effet de la pression. Dans la deuxième partie, nous traitons le cas du complexe  $(D^+, X)$ , à cet effet, nous avons pris le cas du processus de dissociation le plus probable, et nous avons discuté les interactions électron-trou-donneur ionisé en calculant les énergies de liaison, les énergies de localisation et le décalage diamagnétique de ce complexe en présence du champ magnétique, sous l'effet du milieu hôte de la boîte quantique, aussi le rôle du rapport

massique dans la stabilité de  $(D^+, X)$  a été investigué. Nous terminons notre étude par l'investigation des propriétés optiques et magnéto-optiques de  $(D^+, X)$  en tenant compte de deux différents processus de dissociation. Une comparaison avec l'exciton a permis de bien comprendre le rôle de donneur ionisé dans les réponses optiques.

**Mots clés** : Boite quantique sphérique, Cœur/coquille, Exciton, Complexe  $(D^+, X)$ , Propriétés optoélectroniques, Énergie de liaison, Énergie de transition, Coefficient d'absorption optique, Indice de réfraction, Pression, Température, Champ magnétique.

**Mar 03 11:00-11:30 Excitons in spherical colloidal quantum dots, R. L. Restrepo<sup>1</sup>,  
Walter Ospina-Muñoz<sup>1</sup>, E. Feddi<sup>2</sup>, M. E. Mora-Ramos<sup>3</sup>, J. A. Vinasco<sup>4</sup>, A. L. Morales<sup>4</sup>  
and C. A. Duque<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Universidad EIA, Envigado, Colombia.

<sup>2</sup>Group of Optoelectronic of Semiconductors and Nanomaterials,  
Mohammed V University in Rabat, Morocco.

<sup>3</sup>Centro de Investigación en Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México.

<sup>4</sup>Grupo de Materia Condensada-UdeA, Instituto de Física, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Antioquia, Medellín, Colombia.

We calculated exciton states in spherical semiconductor quantum dots, employing the finite element method to numerically solve the system of differential equations for the center of mass and relative motion of the interacting electron-hole pair. This process is performed within the effective mass and parabolic bands approximations. The use of a finite confinement together with a parabolic description of the conduction and valence band profiles prevents the two equations from uncoupling. The allowed energies are reported as functions of the quantum dot radius. A comparison of theoretically determined fundamental photoluminescence peak energies with available experimental reports in the cases of CdS, CdSe and CdTe is presented and discussed, showing a good agreement between calculated and measured results.

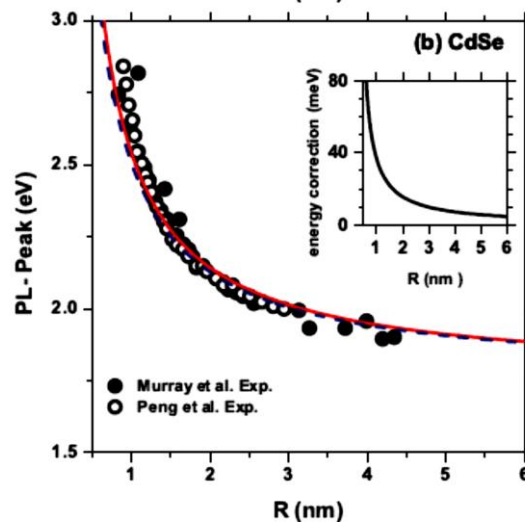


Figure 1. Theoretical and experimental photoluminescence peak energy as a function of the quantum dot radius related to 1s exciton state in CdSe.

**Mar 04 11:30-12:00 Efecto Berreman en metamateriales bimetálicos, F. Pérez-Rodríguez<sup>1</sup>, S. Cortés-López<sup>1</sup>, S.L. Gastélum-Acuña<sup>2</sup>, F.J. Flores-Ruiz<sup>3</sup>, V. Garcia-Vazquez<sup>1</sup>, R. García-Llamas<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla*

<sup>2</sup>*CONACYT-Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora*

<sup>3</sup>*CONACYT-Benemérita Universidad Autónoma de Puebla*

<sup>4</sup>*Departamento de Investigación en Física, Universidad de Sonora*

Se presenta una revisión de la respuesta óptica de una multicapa binaria regular compuesta de capas nanométricas de Al y Ag. El estudio teórico y experimental de este tipo de sistema [1] ha permitido determinar que sus espectros de reflectividad tanto para las geometrías de polarización  $s$  como  $p$  ( $R_s$  and  $R_p$ , respectivamente) son notablemente diferentes debido a la aparición, en el último espectro, de un mínimo prominente cerca del cero de la permitividad de la plata. Tal efecto es similar al de Berreman que se observa en películas de cristales polares cerca de la frecuencia del fonón óptico longitudinal, así como en películas metálicas delgadas cerca de la frecuencia de plasma. Tanto la aproximación de medio efectivo como el formalismo de homogeneización no local, que es válido más allá del límite de grandes longitudes de onda, predicen que la multicapa bimetálica se comporta como un metamaterial anisótropo uniaxial. Además se demuestra que la aparición del mínimo en el espectro de polarización  $p$  está relacionada con el cero de la componente longitudinal de la permitividad ( $\epsilon_z$ ). El cálculo del espectro de la reflectometría de 45 grados, a saber, la diferencia  $R_p - R_s^2$ , con los datos experimentales y teóricos confirma que el mínimo observado en  $R_p$  se debe a la resonancia de plasma de la función de pérdidas de energía  $\Im(-1/\epsilon_z)$ .

[1] S. Cortés-López, S.L. Gastélum-Acuña, F.J. Flores-Ruiz, et al, Optical Materials 99 (2020) 109578.

Se agradece apoyo económico de: CONACyT, VIEP-BUAP, y PFCE.



**Mar 05 12:00-12:30 Polarímetro de estado sólido de un sólo disparo basado en GaAsN, Alejandro Kunold**

En este trabajo presento mis últimos resultados en el diseño de un dispositivo capaz de medir el grado de polarización circular, la intensidad luminosa y el ángulo de incidencia en un solo disparo a temperatura ambiente. El dispositivo se basa en una nanoestructura de GaAsN que puede ser integrada fácilmente con la electrónica estándar. El polarímetro propuesto utiliza la recombinación dependiente del espín (SDR) y la interacción hiperfina entre el electrón ligado y el núcleo de trampas paramagnéticas de Ga  $2+$ . La SDR ha sido ampliamente estudiada experimental y teóricamente dado que ofrece múltiples aplicaciones en espintrónica de estado sólido. Fue primero observada en silicio y más adelante en aleaciones de GaAs con un pequeño contenido de nitrógeno. La SDR es un mecanismo de recombinación, en el que un electrón en la banda de conducción de un semiconductor es capturado por un centro paramagnético de manera selectiva, de acuerdo a la orientación relativa entre el espín del electrón capturado y el del centro. Una de las consecuencias más asombrosas de este mecanismo es que permite alcanzar polarizaciones del espín de los electrones de la banda de conducción cercanas al 100% a temperatura ambiente. Junto con la interacción hiperfina, que tiene lugar en los centros, permite también controlar la polarización del espín nuclear.

Presentaré los resultados experimentales más importantes relacionados con la SDR en GaAsN. Entre ellos está un esquema de bombeo y prueba que permite la detección del espín nuclear con resolución temporal [1]. También mostraré, de manera muy resumida, un modelo basado en la teoría de sistemas cuánticos abiertos que tiene un gran poder de predicción [2,3]. Entre otras cosas, este modelo fue fundamental para el diseño del polarímetro. Finalmente presentaré algunos resultados experimentales y teóricos que muestran que es posible convertir el grado de polarización circular de la luz incidente en una señal eléctrica.

1. Phys. Rev. B 97, 155201 (2018)
2. Phys. Rev. B 95, 195204 (2017)
3. Phys. Rev. B 101, 075201 (2020)

**Mar 06 12:30-13:00 Estructura electrónica de sistemas con pozos cuánticos delta-dopados múltiples, Humberto Noverola Gamas<sup>1,\*</sup>, Outmane Oubram<sup>2</sup>, Luis Manuel Gaggero Sager<sup>3</sup>**

<sup>1</sup>División Académica de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco.  
Cunduacán Tabasco México.

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

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

\* email: [noverola86@gmail.com](mailto:noverola86@gmail.com)

Dentro de los sistemas de gran relevancia en la física de Semiconductores se encuentran los pozos cuánticos delta-dopados, los cuales se fabrican al dopar un semiconductor con otro elemento en una capa bidimensional de ancho atómico. Derivado de esta idea surgieron los pozos delta- dopados dobles DDD, los cuales consisten en semiconductores fuertemente dopados en dos capas bidimensionales paralelas de ancho atómico. En el marco de la teoría de Thomas-Fermi hemos determinado la estructura electrónica de un sistema DDD en GaAs, y particularmente estudiamos los efectos de la distancia interplanar en las propiedades ópticas no lineales de este sistema con dopaje tipo  $n$  y tipo  $p$  [1,2]. Dichas propiedades están determinadas en función de dos parámetros principales: la concentración del dopante y la distancia de separación entre las capas. Así pues calculamos el coeficiente de absorción y el cambio en el índice de refracción para electrones y huecos pesados como medida de la distancia entre capas dopantes. Además hemos propuesto un modelo físico para estudiar la estructura electrónica en un sistema delta dopado cuádruple (DDC) con dopaje tipo  $n$  [3], como medida de los parámetros previamente citados.

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

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

[3] Noverola-Gamas H, Gaggero-Sager LM, Oubram O. Model of  $n$ -type quadruple  $\delta$ -doped GaAs quantum wells. *Eur. Phys. J. B* 2020; **93**: 18-22.

**Mar 07 15:00-16:00 Diseño de nanocomplejos teranósticos para la entrega dirigida de medicamentos, terapia fotodinámica y terapia fototérmica contra cáncer de mama HER2+, Elder De la Rosa<sup>1,\*</sup>, Gonzalo Ramirez<sup>2</sup>, Sandeep Panikar<sup>3</sup>, Pedro Salas<sup>3</sup>, Tanya Camacho<sup>4</sup>**

*1Grupo de Nanofotónica y Materiales Avanzados, Facultad de Ingenierías, Universidad De La Salle Bajío*

*(UDLSB), León Gto. 37150 México.*

*2Centro de Investigación en Química Aplicada, Saltillo, Coah. 25294 México.*

*3Centro de Física Aplicada y Tecnología Avanzada, UNAM, Juriquilla, Qro. México.*

*4Depto. de Biotecnología Médica y Farmacéutica, Centro de Investigación y Asistencia en Tecnología y Diseño del Estado de Jalisco, Guadalajara, Jalisco 44270, México.*

\* email: [edelarosa@delasalle.edu.mx](mailto:edelarosa@delasalle.edu.mx)

La teranóstica trata sobre el diseño de nanocomplejos teranósticos (TENACO) capaces de obtener simultáneamente, imagen, detección y terapia.

En este trabajo reportamos resultados recientes, obtenidos en nuestro grupo, sobre el diseño y aplicación de nanocomplejos teranósticos basados en el uso de nanopartículas de conversión ascendente (UCNPs). Éstas, convierten la excitación en el cercano infrarrojo (970 nm) en emisión en la región visible del espectro, ultravioleta (350 nm), azul (470 nm), verde (520 nm), rojo (670 nm) y cercano infrarrojo (806 nm) mediante la combinación adecuada de lantánidos.

Este tipo de NPs, son ideales para resolver el problema de la penetración limitada de señales de excitación, típicamente en la región visible del espectro, tanto para la terapia fototérmica (PTT) como la terapia fotodinámica (PDT). En nuestro caso diseñamos NPs fluoradas (NaYF<sub>4</sub>) dopadas con iones de Yb<sup>3+</sup> que absorben la señal de excitación y transfiere la energía absorbida a los iones de Er<sup>3+</sup> para producir emisión verde y roja, y a los iones de Tm<sup>3+</sup> para producir luz UV, azul e infrarrojo, o la combinación adecuada para sintonizar las bandas de emisión deseadas.

Para el caso de nanocomplejos teranósticos utilizados en PTT, diseñamos UCNPs decoradas en su superficie con nanopartículas de oro (AuNPs). La emisión verde obtenida del Er<sup>3+</sup> excita el plasmón de resonancia localizada (LSPR) de las NPs de oro produciendo un incremento localizado de temperatura capaz de inducir daño irreversible a las células donde se encuentran localizados los TENACOs. Los resultados experimentales muestran que la viabilidad celular se reduce al 40% en células con cáncer de mama (BCC) del tipo MCF-7 que son HER2 negativas, después de 5 minutos de excitación a 970 nm. Se evalúa la razón entre las emisiones asociadas a las transiciones acopladas térmicamente 2H<sub>11/2</sub> y 4S<sub>3/2</sub>, en la banda verde, que permite monitorear simultáneamente la temperatura alrededor del nanocomplejo.

Para demostrar la PDT, utilizamos cianinas de zinc (ZnPC) como fotosensibilizador (PS) adsorbidas a la superficie de las UCNPs. En este caso, la emisión roja del Er<sup>3+</sup> es absorbida por la cianina que a su vez transfiere la energía al oxígeno molecular que se encuentra a su alrededor para producir especies reactivas de oxígeno (ROS) que son las responsables de la PDT induciendo la muerte de las BCC. En este caso, el nanocomplejo se conjuga con el anticuerpo monoclonal específico Trastuzumab (Tras) para la detección y tratamiento selectivo de BCC que sobre expresan HER2+

(SKBR-3). Los resultados muestran que la viabilidad celular se reduce al 20% después de ser excitados durante 5 minutos.

Más aún, cuando reemplazamos el PS por una capa fotocatalítica de  $\text{TiO}_2/\text{ZrO}_2$  que se excita con luz UV producida por iones de  $\text{Tm}^{3+}$ , la viabilidad celular se reduce en 88%. En este caso la banda en 801 nm se utiliza para obtener imágenes de las células marcadas.

Finalmente, presentamos resultados obtenidos con nanocomplejos de liposomas cargados con UCNPS, PS para PDT y doxorubicina para quimio terapia. Los resultados muestran un efecto sinérgico reduciendo la viabilidad celular al 30%.

Los resultados muestran un gran potencial de los nanocomplejos teranósticos para la detección, imagen y terapia de cáncer de mama HER2 positivo.

Agradecemos el soporte y financiamiento a la UDLSB y al CONACYT a través del proyecto 259192.

**Mar 08 16:00-16:30 Comportamiento de heteroestructuras 2D G/hBN al variar la distancia entre capas, R. M. Torres-Rojas<sup>12\*</sup>, D. A. Contreras-Solorio<sup>3</sup>, L. Hernández<sup>4</sup> and A. Enciso<sup>3</sup>**

<sup>1</sup> Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Czda. Solidaridad y Paseo La Bufa S/N, 98060, Zacatecas, Zac., México

<sup>2</sup> Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología, Av. Insurgentes Sur 1582. Colonia Crédito Constructor, Del. Benito Juárez, CP 03940 Ciudad de México, México

<sup>3</sup> Unidad académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Carretera Zacatecas-Guadalajara km 6 Ejido la Escondida, Campus UAZ Siglo XXI, 98060, Zacatecas, Zac., México

<sup>4</sup> Facultad de Física, Universidad de la Habana, Colina Universitaria, 10400, La Habana, Cuba

\*Autor de correspondencia: rtorres@fisica.uaz.edu.mx

El número de materiales bidimensionales (2D) aumenta año con año cubriendo una amplia gama de propiedades, y están llamados a ser clave en la próxima generación de dispositivos electrónicos. El grafeno (G) y el nitruro de boro hexagonal (hBN) son dos materiales 2D extraordinarios que tienen una estructura muy similar tipo panal de abejas, sin embargo, mientras el G es un semimetal (gap = 0 eV), el hBN es un aislante con gap de ~6eV.

Las heteroestructuras formadas por 2 o más capas de estos materiales interaccionando a través de fuerzas de van der Waals han mostrado gran aplicación en diferentes dispositivos electrónicos. Y dependiendo de la configuración y el número de capas de cada material se ha evidenciado la aparición de un pequeño band gap que puede llegar a los 114 meV.

Las interacciones de van der Waals permiten la posibilidad de variar la distancia entre capas de las heteroestructuras con relativa facilidad, sin embargo, el cambio de las propiedades estructurales y electrónicas es aún un tema de discusión.

En este trabajo, en el marco de la teoría del funcional de la densidad (DFT), mostramos resultados de las propiedades estructurales y electrónicas de 3 diferentes heteroestructuras 2D por capas, G/hBN (gap 56 meV), hBN/G/hBN (Gap = 110 meV) y 2hBN/G/2hBN (Gap = 114 meV) al variar la distancia entre capas.

**Mar 09 16:30-17:00 Effects of disorder on the transport and thermoelectric properties of silicene superlattices, *O.Oubram*<sup>a</sup>, *O.Navarro*<sup>b</sup>, *E.J.Guzmán*<sup>c</sup>, *I.Rodríguez-Vargas*<sup>c</sup>**

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

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

<sup>c</sup> *Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Carretera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, Ejido La Escondida, 98160 Zacatecas, Zac., México*

Unavoidable structural disorder associated with the variation of the widths of barriers and wells as well

as the heights of barriers in superlattices of 2D materials can affect considerably electronic transport and related phenomena. In this work, we study the impact of structural disorder on the electronic transport and thermoelectric properties of gated silicene superlattices (GSSLs). A low-energy effective Hamiltonian has been used to describe electrons in silicene. The transfer matrix approach, the Landauer–Büttiker formalism and the Cutler–Mott formula have been implemented to obtain the transport and thermoelectric properties. In particular, the conductance, Seebeck coefficient and power factor are investigated in ordered and disordered GSSLs. The results show that disorder related to the width of barriers-wells is not equivalent to the one associated to the height of barriers. The former barely changes the transport and thermoelectric coefficients at low energy, while the latter greatly affects them in the whole energy range. We also assess the disorder associated to the on-site potential of silicene layers, finding that its influence is limited. So, our results indicate that in the design and fabrication of GSSLs a precise control of the height of the barriers is required in order to have and preserve good thermoelectric properties.

**Mar 10 17:00-17:30 Efectos termoeléctricos en superredes aperiódicas basadas en grafeno, Sergio Molina Valdovinos, Eric J. Guzman, I. Rodriguez-Vargas**

*Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Carretera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, ejido La Escondida, C.P. 98160, Zacatecas, Zac., México.*

Fecha del taller: 28-30 de Septiembre 2020

La termoelectricidad en sistemas de baja dimensión es un concepto clave en la termoelectricidad moderna. Este concepto se refiere a la posibilidad de mejorar el desempeño de dispositivos termoeléctricos mediante la reducción de la dimensionalidad de los dispositivos o dicho de otra manera mediante la reducción de la dimensionalidad de los materiales que componen los dispositivos. Entre las estructuras de baja dimensión más exitosas podemos encontrar superredes de pozos cuánticos, hilos y puntos cuánticos.

En esta platica presentaremos un estudio numérico de las propiedades termoeléctricas de superredes de grafeno aperiódicas generadas mediante la aplicación una serie de electrodos los cuales se ordenan siguiendo las secuencias de Fibonacci y Thue-Morse. Encontramos que la aperiodicidad reduce y fragmenta las bandas de transmisión naturales en superredes periódicas y redistribuye la densidad de estados del sistema. También encontramos una reducción general de la conductancia en superredes de grafeno aperiódicas con respecto a las periódicas. Además, a medida que aumenta la generación de la estructura aperiódica, la conductancia disminuye y surgen una serie de picos en ella. Este comportamiento es más pronunciado en las superredes de Thue-Morse que en las de Fibonacci. En el caso de las propiedades termoeléctricas, obtenemos que las superredes de grafeno de Fibonacci presentan valores similares para el coeficiente de Seebeck y el factor de potencia como en las superredes de grafeno periódicas, mientras que las superredes de grafeno de Thue-Morse muestran una mejora de las propiedades termoeléctricas, en particular, el factor de potencia es dos veces más grande que el correspondiente a las superredes de grafeno periódicas y de Fibonacci. Entonces, de acuerdo con nuestros resultados, la aperiodicidad se puede usar como un parámetro de ajuste para mejorar las propiedades termoeléctricas de las superredes de grafeno.

**Mar 11 17:30-18:00 Self-similar transport, spin polarization and thermoelectricity in complex silicene structures, R. Rodríguez-González<sup>1</sup>, L. M. Gaggero-Sager<sup>2</sup> and I. Rodríguez-Vargas<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Carretera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, Ejido La Escondida, 98160 Zacatecas, Zac., México

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

We investigate the transport, spin polarization and thermoelectric properties of complex silicene structures. The complex structures are generated through metallic electrodes arranged in complex self-similar geometries. We assume a quantum relativistic description for the silicene charge carriers. The theoretical treatment is based on the transfer matrix method, the Landauer-Büttiker formalism and the Cutler-Mott formula. In particular, we show that Cantor-like silicene structures displays self-similar characteristics in the conductance, spin polarization and Seebeck coefficient for both electron spin components. In addition, we can quantify numerically the self-similar patterns of the physical properties with well-defined scaling rules. The scaling expressions are involved with the structural parameters of the complex system such as the generation number, the height of the barriers and the length of the system. To our knowledge, this is the first time that self-similar transport is reported beyond monolayer graphene. Moreover, a material that manifests self-similar characteristics in relevant quantities such as the spin polarization and the Seebeck coefficient.



**Mar 12 18:00-18:30 Extracción de características usando Procesamiento Digital de Señales, Seuret-Jiménez Diego1, Trutié-Carrero Eduardo**

<sup>1</sup>Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, LPS, Ave. Universidad 1001, Chamilpa, 62209.  
email: dseuret@uaem.mx

Palabras clave: Exponente de Lipschitz, espectro de singularidades, sistemas fotovoltaicos

**Introducción.** La energía solar se adquiere mediante sistemas fotovoltaicos (SFV). La curva I-V de un módulo fotovoltaico se puede escalar para representar una matriz; obteniendo una característica IV resultante y punto de máxima potencia como la suma horizontal y vertical de los bloques de construcción individual. Los SFV presentan fallas que mitigan su producción de energía eléctrica; resaltando su interés en la comunidad científica (Yi & Etemadi, 2017), (Fazai et al., 2019), (Basnet et al., 2020).

Este trabajo presenta un nuevo algoritmo de extracción de características basado en espectro de singularidades fundamentado en la transformada Wavelet discreta (TWD) y el exponente de Lipschitz ( $\alpha$ ).

**Metodología.** (Mallat, 2009) define la TWD diádica para una señal  $f(t)$  como se presenta en la Ecuación (1) y (Trutié-Carrero et al., 2020) definen el  $\alpha$ , como se presenta en la Ecuación (2)

$$Wf(k, j) = \frac{1}{\sqrt{2^j}} \int_{-\infty}^{\infty} f(t) \psi^*(2^{-j}t - k) \quad (1)$$

donde:  $j$  es el  $j$ -ésimo nivel de descomposición  
y  $k$  el parámetro de traslación.

$$\hat{\alpha} = -\frac{\log_2 \left( \frac{|Wf(k, j)|_{\max}}{A} \right)}{j} - \frac{1}{2} \quad \forall A \in \mathbb{R}^+ \quad (2)$$

**Resultados.** En la Figura 1 se observa la característica IV de la señal sin falla y con falla, posteriormente en la Figura 2 se observa el resultado del nuevo algoritmo, espectro de singularidades.

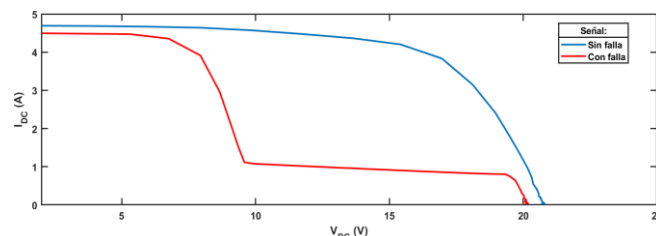


Figura 1: Característica IV del SFV. Color azul sin falla y color rojo falla generada por polvo.

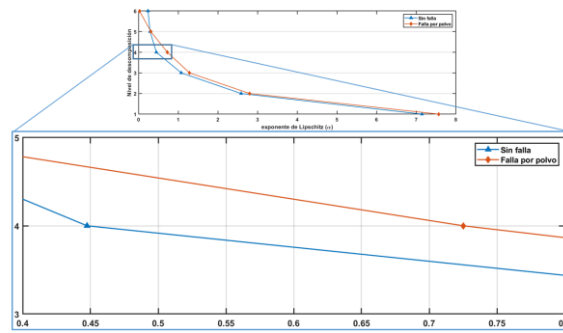


Figura 2: Resultado del algoritmo. En la abscisa ( $\alpha$ ) y en la ordenada nivel de descomposición.

**Conclusiones.** Se obtuvo un nuevo algoritmo para extraer características de módulos fotovoltaicos el cual permite detectar falla bajo el criterio de experto. Además, admite conocer en qué nivel de descomposición hay que trabajar con la transformada Wavelet discreta.

**Agradecimientos.** Los autores agradecen al CONACyT.

### Bibliografía.

- Basnet, B., Chun, H., & Bang, J. (2020). An Intelligent Fault Detection Model for Fault Detection in Photovoltaic Systems. *Journal of Sensors*, 2020. <https://doi.org/10.1155/2020/6960328>
- Fazai, R., Abodayeh, K., Mansouri, M., Trabelsi, M., Nounou, H., Nounou, M., & Georghiou, G. E. (2019). Machine learning-based statistical testing hypothesis for fault detection in photovoltaic systems. *Solar Energy*, 190, 405–413. <https://doi.org/10.1016/j.solener.2019.08.032>
- Mallat, S. (2009). A Wavelet Tour of Signal Processing. *A Wavelet Tour of Signal Processing*. <https://doi.org/10.1016/B978-0-12-374370-1.X0001-8>
- Trutié-Carrero, E., Cabrera-Hernández, Y., Hernández-González, A., & Ramírez-Beltrán, J. (2020). Automatic detection of burst in water distribution systems by Lipschitz exponent and Wavelet correlation criterion. *Measurement*, 151. <https://doi.org/10.1016/j.measurement.2019.107195>
- Yi, Z., & Etemadi, A. H. (2017). Fault detection for photovoltaic systems based on multi-resolution signal decomposition and fuzzy inference systems. *IEEE Transactions on Smart Grid*, 8(3), 1274–1283. <https://doi.org/10.1109/TSG.2016.2587244>

**Martes 01 Status and perspectives of emerging thin film photovoltaic inorganic materials, Z. Jehl<sup>1</sup>, J. Puigdollers<sup>1</sup>, M. Placidi<sup>1</sup>, S. Giraldo<sup>2</sup>, K. Tiwari<sup>2</sup>, E. Saucedo<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>Photovoltaic Group, Electronic Engineering Department, Polytechnic University of Catalonia (UPC), Barcelona, Spain.

<sup>2</sup>Catalonia Institute for Energy Research (IREC), Sant Adrià del Besòs-Barcelona, Spain

\*E-mail: edgardo.saucedo@upc.edu

**Abstract –**

In the last few years, the interest and research on new thin film inorganic materials for photovoltaic (PV) applications have largely increased. There are two main motivations for this: i. the necessity to substitute scarce and/or expensive materials currently used in the thin film photovoltaic industry (such as In, Ga or Te); and ii. the necessity of materials with new properties that are required for non-conventional PV applications (flexible, transparent). In this context, kesterite type semiconductors, including  $\text{Cu}_2\text{ZnSn}(\text{S},\text{Se})_4$  (CZTSSe),  $\text{Cu}_2\text{ZnSnS}_4$  (CZTS), and  $\text{Cu}_2\text{ZnSnSe}_4$  (CZTSe) are recognized as one of the most relevant and promising thin film photovoltaic technologies.

In the first part of the presentation, the most relevant progresses achieved for kesterite in the last years will be reviewed, focusing on the recent strategies followed to improve their efficiency, that are mainly based on the partial cationic and anionic substitution including Cu by Ag, Zn by Cd, Mn and Mg, Sn by Ge, extended to the S, Se and Te substitutions as possible anions in the structure. In the second part of the presentation, other relevant emerging photovoltaic materials will be discussed, including oxides, pnictides and halides, giving insights about the most promising ones for different PV applications.

**Keywords:** emerging materials, thin film photovoltaics, solar cells, chalcogenides

**Acknowledgments:** H2020 Programme project SENSATE (H2020-ERC-CoG-2019-866018)

**Martes 02 The effect of Se/(S+Se) compositional ratios on the performance of SnS-based solar cell: a numerical simulation, Isaac Montoya De Los Santos<sup>a,\*</sup>, Hugo J. Cortina-Marrero<sup>a</sup>, L. Hechavarría-Difur<sup>a</sup>, F. J. Sánchez-Rodríguez<sup>b</sup>, C. A. Meza-Avendaño<sup>c</sup>, J. A. Borrego-Pérez<sup>d</sup>, Víctor I. Moreno-Oliva<sup>a</sup>, Edwin Román-Hernández<sup>a</sup>, Maykel Courel<sup>e</sup>**

<sup>a</sup>Instituto de Estudios de la Energía, Universidad del Istmo, C.P. 70760, Santo Domingo Tehuantepec, Oaxaca, Mexico.

<sup>b</sup>Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Universidad Autónoma de Sinaloa, C.P. 80010, Culiacán, Sinaloa, Mexico.

<sup>c</sup>Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables, Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas, C.P. 29039, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, Mexico.

<sup>d</sup>Departamento de Materiales, Facultad de Ingeniería Civil, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, C.P. 58004, Morelia, Michoacán, Mexico.

<sup>e</sup>Centro Universitario de los Valles, Universidad de Guadalajara, C.P. 46600, Ameca, Jalisco, Mexico.

\* Email: isaacms88@gmail.com

In this work, a path to overcome the highest current efficiency on SnS thin-film solar cell by the Se incorporation is presented. We carried out a theoretical study of the effect of different Se/(S+Se) compositional ratios (from 0.0 to 1.0) on the solar cell performance. In this sense, an improvement on power conversion efficiency (PCE) by decreasing the energy band gap (theoretical Se incorporation) from 1.35 to 1.08 eV was observed. All electrical output parameters ( $V_{oc}$ ,  $J_{sc}$ , FF and PCE) were increased by an augment of the compositional ratio (CR) from 0.25 to 0.75. A PCE of 10.23% was obtained for a CR of 0.75. Furthermore, a thickness optimization of the absorber was carried out, where the greatest PCE of 11.78% was obtained at 800 nm. On the other hand, a simulation at different work functions in back contact and different bulk defect density on the absorber were performed in order to achieve higher efficiencies.

**Keywords:** SnS solar cells, Se/(S+Se) compositional ratios, Solar cell optimization, SCAPS-1D.

### **Acknowledgements**

Authors wish to thank Dr. Marc Burgelman from University of Gent for providing SCAPS software.

## Martes 03 Semiconductor thin films for energy conversion, P. K. Nair

IER-UNAM; pkn@ier.unam.mx

Solar energy utilization requires matter interacting with solar radiation over large area. Chemical deposition of semiconductor thin films is appropriate for such large area coatings. An illustration of this is in solar control coating, which leads to energy saving and comfort in buildings [1]. After depositing a semiconductor film, heating it in a chosen ambient changes its composition for a desired application. Chemically deposited SnS thin film becomes  $\text{Sn}_2\text{S}_3$  at 450 °C in S-vapor, suggested as a photovoltaic material [2]. Also, the same SnS becomes p-type SnS:Se or n-type  $\text{SnSe}_2$ , at 350 °C in Se-vapor for thermoelectric conversion of energy [3]. Sequential chemical deposition of  $\text{CdS/Sb}_2(\text{S-Se})_3$  on  $\text{SnO}_2:\text{F}$  (FTO) and heating it at 280 °C makes prototype photovoltaic modules, which light LED's [4]. Semiconductor thin films of CuS-Cu<sub>2</sub>Se can filter-off UV-Blue part of solar radiation and helps solar drying of fruits and vegetables, with less darkening [5]. Overall, semiconductor thin films are suitable for many innovative ideas. To gain an understanding of semiconductors is scientifically interesting.

### References

- [1] Aguilar et al., Optical and mechanical characteristics of clear and solar control laminated glass using zinc sulphide and copper sulphide thin films, Surf. Coatings Technol. 200 (2005) 2557 DOI: 10.1016/j.surfcoat.2004.10.140
- [2] Mohan et al., Thin film  $\text{Sn}_2\text{S}_3$  via chemical deposition and controlled heating – Its prospects as a solar cell absorber, Appl. Surf. Sci. 504 (2020) 144162 DOI: 10.1016/j.apsusc.2019.144162
- [3] Barrios-Salgado et al., Thin film thermoelectric elements of p – n tin chalcogenides from chemically deposited SnS-SnSe stacks of cubic crystalline structure, Semicond. Sci. Technol. (2020) DOI: 10.1088/1361-6641/ab6a7a
- [4] Nair et al., Chemically Deposited Antimony Sulfide Selenide Thin Film Photovoltaic Prototype Modules, ECS JSST 8 (2019) Q89 DOI: 10.1149/2.0101906jss
- [5] Nair et al., Prospects toward UV-blue filtered solar drying of agricultural farm produce using chemically deposited copper chalcogenide thin films on cellular polycarbonate, Solar Energy 203(2020)123 DOI: 10.1016/j.solener.2020.04.012

**Martes 04 Estado actual y perspectivas de nuevas celdas solares emergentes  
basadas en calcogenuros de antimonio, Osvaldo Vigil Galán**

Instituto Politécnico Nacional-ESFM, 07738, Ciudad de México, México

Calcogenuros de antimonio como  $\text{Sb}_2\text{S}_3$ ,  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  y  $\text{Sb}_2(\text{Se}_{1-x}\text{S}_x)_3$  han surgido como materiales absorbentes muy prometedores debido a su alta estabilidad, abundancia de los elementos constituyente, no toxicidad, bajo costo, adecuada banda sintonizable y alto coeficiente de absorción. Logros notables han sido obtenidos en celdas solares de calcogenuro de antimonio en las últimas décadas, sin embargo; diversos aspectos relacionados con las propiedades de los compuestos y las celdas solares deben ser superados.

En el presente trabajo, se describen las limitaciones más importantes en las tecnologías de las celdas solares, proporcionándose los enfoques encaminados para lograr avances notables en las celdas solares de calcogenuro de antimonio en el futuro.

**Martes 05 Celdas solares reducidas en cadmio, M.L. Albor-Aguilera<sup>1\*</sup>, U. Galarza-Gutierrez<sup>1</sup>, J.A. Ortega Cárdenas<sup>1</sup>, C. Hernandez Vasquez<sup>2</sup>, M.A. GonzálezTrujillo<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México.

<sup>2</sup> INSTITUTO POLITÉCNICO NACIONAL-ESCOM, Formación Básica, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México.

\*[ourdesalbor10@gmail.com](mailto:ourdesalbor10@gmail.com)

En el desarrollo de celdas solares fotovoltaicas es bien sabido que el semiconductor CdS es utilizado como material ventana debido a sus propiedades optoelectrónicas. El CdS es un material semiconductor que pertenece a la familia II-VI, éste presenta una conductividad tipo n debido a sus defectos nativos, además tiene un brecha prohibida directa del orden de 2.4 eV a temperatura ambiente. Sin embargo existen controversias relacionadas con el uso de Cd en módulos fotovoltaicos debido a que este material pueda tener un impacto negativo en el medio ambiente. En ese sentido, explotar nuevos materiales libres de Cd que tengan propiedades similares al CdS para ser utilizados como material ventana en el desarrollo de dispositivos fotovoltaicos han resultado ser de gran interés. Materiales semiconductores tales como el ZnS y el In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> son compuestos semiconductores con valores de brecha prohibida del orden de 3.7 eV y 2.8 eV respectivamente; debido a que estos materiales absorben fotones en la región ultravioleta son candidatos potenciales en el desarrollo de dispositivos optoelectrónicos. En este trabajo se presentan el estudio de las propiedades físicas de películas delgadas de ZnS e In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> y su aplicación en el desarrollo de celdas solares fotovoltaicas reducidas en cadmio.

**Palabras clave:** ZnS, In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, celdas solares, reducción de Cd.

**Agradecimientos:** Este trabajo fue apoyado por los proyectos SIP 20200511 y SIP 20200509.

**Martes 06 Películas de óxido de cerio con textura controlada para aplicaciones en la generación de hidrógeno, Inti Zumeta-Dubé<sup>1</sup>, José Manuel García Rangel<sup>2</sup>, Gabriela Mariela Reyes Chaparro<sup>2</sup>, Mario Fidel García Sánchez<sup>2,\*</sup>**

<sup>1</sup> Instituto Politécnico Nacional, Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, Unidad Legaria, Legaria 694, Col. Irrigación, Miguel Hidalgo, CDMX, 11500, México.

<sup>2</sup> Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y Tecnologías Avanzadas. Instituto Politécnico Nacional, Av. I.P.N. 2580, Gustavo A. Madero, Ciudad de México, 07340, México.

\*correo electrónico: mgarciasan@ipn.mx

El control de la morfología y la textura de las películas delgadas de CeO<sub>2</sub> es objetivo actual de muchos autores por sus diferentes aplicaciones en catálisis, ventanas inteligentes, etc. Sin embargo, el diseño de métodos precisos, rentables y escalables, con potencial para cubrir grandes áreas que permitan la producción de películas delgadas con alta textura sigue siendo un desafío tecnológico. En el presente trabajo se demuestra que, bajo condiciones adecuadas de crecimiento, la técnica de rocío pirolítico ultrasónico permite obtener películas de CeO<sub>2</sub> policristalino con textura controlada, ya sea en las direcciones (100) y (111), así como con orientaciones aleatorias. Para lograr este objetivo se modificaron los flujos, la molaridad de la solución y la temperatura del sustrato. Las películas se caracterizaron por difracción de rayos X, UV-vis, microscopía electrónica de barrido, espectroscopía Raman y fotoluminiscencia. Resultados preliminares mostraron buen rendimiento en la producción fotoelectroquímica de hidrógeno. Los resultados obtenidos se discuten sobre la base de la dependencia combinada de la estabilidad termodinámica de las superficies expuestas a CeO<sub>2</sub> y la cinética de reacción, que modula la dirección de crecimiento de los cristallitos.

**Agradecimientos:**

Inti Zumeta Agradece las facilidades otorgadas por el Laboratorio Nacional de Conversión y Almacenamiento de Energía (LNCAE). Este trabajo ha sido financiado por el IPN con el proyecto 20201523, y por SECTEI con el proyecto 289/2019.

**Palabras claves:** Óxido de cerio nanoestructurado, películas delgadas, textura, rocío pirolítico ultrasónico.



**Martes 07 Análisis de inhomogeneidad en celdas solares de perovskitas a través de fotoluminiscencia resuelta a diferentes profundidades ópticas, E. Regalado-Pérez<sup>\*a</sup>, E. B Díaz-Cruza, J. Landa-Bautista<sup>a</sup>, N. R. Mathews<sup>a</sup>, X. Mathew<sup>\*a</sup>**

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

\*E-mail: eurepe@ier.unam.mx, xm@ier.unam.mx

El análisis y control de las inhomogeneidades espaciales de los materiales absorbedores son factores claves para el escalamiento de las celdas solares a nivel industrial. Particularmente en las celdas solares de perovskitas (PSCs), la inhomogeneidad resulta de suma importancia ya que impacta en su estabilidad y rendimiento. En este trabajo, presentamos un análisis de inhomogeneidad de PSCs utilizando espectroscopia de fotoluminiscencia (PL) con diferentes longitudes de onda de excitación (355nm, 515nm y 633nm), lo que permite controlar la longitud de penetración óptica y la región de emisión de la perovskita. Las PSCs fueron depositadas sobre dos diferentes capas transportadoras de electrones (ETLs) para analizar la influencia de la capa ETL o *scaffold* sobre el crecimiento de grano y la uniformidad de la fotoluminiscencia. Basado en mediciones de PL bajo condiciones de circuito abierto (OC) y de corto circuito (SC), los dispositivos con mayor homogeneidad en tamaño de grano fueron correlacionados con una mayor eficiencia de PL quenching, indicando una extracción de carga más eficiente y mostrando un mejor rendimiento fotovoltaico. Los resultados aquí presentados plantean una metodología para distinguir entre contribuciones radiativas de volumen y de superficie en dispositivos fotovoltaicos, contribuyendo a un mejor entendimiento de los procesos de recombinación en las PSCs.

**Martes 08 Desarrollo de celdas solares del tipo CdTe con una ventana libre de cadmio, Uziel Galarza-Gutiérrez<sup>1</sup>, M. Lourdes Albor-Aguilera<sup>1\*</sup>, Miguel A. González-Trujillo<sup>2</sup>, José Manuel Flores Márquez<sup>3</sup>, César Hernández Vásquez<sup>2</sup>, Rogelio Mendoza Pérez<sup>4</sup>**

<sup>1</sup>Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. De Física, U.P.A.L.M., 07738, CDMX, México

<sup>2</sup>Instituto Politécnico Nacional-ESCOM, Depto. De Ciencias Básicas. U.P.A.L.M., 07738, CDMX, México

<sup>3</sup>Instituto Politécnico Nacional-ESIQIE, Depto. De Metalurgia y Materiales. U.P.A.L.M., 07738, CDMX., México

<sup>4</sup>Universidad Autónoma de la Ciudad de México, Av. Prol. San Isidro 151, San Lorenzo Tezonco. CDMX, 09790, México.

\*E-mail: lourdesalbor10@gmail.com

En el desarrollo de celdas solares de película delgada, el material semiconductor más comúnmente usado como capa de ventana es el CdS. Sin embargo, el valor de brecha prohibida del CdS (2,42 eV) no permite que fotones de la región azul del espectro electromagnético contribuyan con la generación de fotocorriente. Por otro lado, el procesamiento de CdS a escala industrial tiene una desventaja pues el Cd es un elemento tóxico. Se ha propuesto como posible solución utilizar In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> que es un semiconductor con una brecha prohibida más ancha que el CdS y este puede ser utilizado como capa venta en celdas solares debido a sus propiedades físicas similares al CdS. En este trabajo celdas solares tipo CdTe han sido desarrolladas usando In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> como material ventana. Los parámetros eléctricos de los dispositivos tales como J<sub>SC</sub> y V<sub>OC</sub> fueron mejoradas.

**Palabras Clave:** *CdS, In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, Celdas Solares, CdTe.*

**Agradecimientos:** Este trabajo fue apoyado por los proyectos SIP20200511, SIP 20200509 y SIP20200508.

**Martes 09 Síntesis de nanopartículas  $CdS_xSe_{1-x}$  partiendo del depósito de bicapas CdS/CdSe usando la técnica de baño químico para aplicaciones de celdas solares, Fernando Javier Sánchez-Rodríguez<sup>a,\*</sup>, Antonio Arce-Plaza<sup>b</sup>, Osvaldo Vigil-Galan<sup>c</sup>, Cristo M. Yee<sup>c</sup>, Maykel Courel<sup>d</sup>**

<sup>a</sup>Universidad Autónoma de Sinaloa, Facultad de Ciencias Físico-Matemáticas, Culiacán Sinaloa, México

<sup>b</sup>Instituto Politécnico Nacional (ESIAZ-IPN), Escuela Superior de Ingeniería y Arquitectura Unidad Zacatenco, CDMX, México

<sup>c</sup>Escuela Superior de Física y Matemáticas—Instituto Politécnico Nacional, CDMX, México

<sup>d</sup>Universidad de Guadalajara, Centro Universitario de Los Valles, Carretera Guadalajara – Ameca, Ameca, Jalisco, México

**Resumen.**

Este trabajo es un proceso alternativo del procesamiento de nanopartículas del material ternario  $CdS_xSe_{1-x}$ , utilizando un depósito secuencial de bicapas de CdS/CdSe usando la técnica de depósito por baño químico sobre un sustrato de vidrio y su subsecuente tratamiento térmico. Se utilizaron dos tipos de sales de cadmio diferentes tales como cloruro de cadmio y nitrato de cadmio como fuentes iónicas de cadmio para los diferentes depósitos de películas delgadas de CdS y CdSe. El impacto de las diferentes sales en la formación de las nanopartículas del material ternario fue estudiado, así como razón composicional de  $S/(S+Se)$ . Las propiedades estructurales, ópticas y morfológicas fueron estudiadas de las nanopartículas de  $CdS_xSe_{1-x}$  depositadas con las razones composicionales de  $x = 0.05, 0.2, 0.78$  y  $0.8$  fueron analizadas. Usando técnicas de caracterización tales como difracción de rayos x, espectrofotometría ultravioleta-visible, espectroscopia Raman, microscopia de barrido electrónico y EDX, fueron utilizadas para caracterizar las nanopartículas de  $CdS_xSe_{1-x}$ . Como un resultado importante, es que se puede ir variando las brechas de energías (band gap) del material ternario en función de la composición de la  $X=S/(S+Se)$ .

**Agradecimientos.** A la Universidad Autónoma de Sinaloa por haber apoyado esta investigación bajo el programa PROFAPI 2015/266

**Martes 10 Evaluación del  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  como capa transportadora de electrones para estructuras n-i-p en celdas de  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ , F Ayala-Mato<sup>1</sup>, O Vigil-Galán<sup>2</sup>, D Seuret-Jiménez<sup>1</sup>, Maykel Courel<sup>3</sup> and Susana Fernández<sup>4</sup>**

<sup>1</sup> Centro de Investigaciones en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Morelos, C.P.62209, México

<sup>2</sup> Escuela Superior de Física y Matemáticas-Instituto Politécnico Nacional (IPN), C.P. 07738, México DF, México.

<sup>3</sup>Centro Universitario de los Valles (CUValles). Universidad de Guadalajara. Carretera Guadalajara - Ameca Km. 45.5, C.P. 46600, Ameca, Jalisco, México.

<sup>4</sup>CIEMAT, División de Energías Renovables, Avda. Complutense 40, 28040 Madrid, Spain.

En este trabajo se estudia al ternario  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  como capa transportadora de electrones (ETL) en la estructura n-i-p para celdas solares de Seleniuro de Antimonio ( $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ ). La idea es reducir la cantidad de Cd al incorporar Zn y mejorar el rendimiento de la celda. La estructura n-i-p se propone para resolver evitar la barrera potencial que se forma entre el  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  y el contacto trasero y contrarrestar el efecto del bajo dopaje de este material. Mediante simulación numérica con el empleo del software SCAPS 1-D se determina la concentración molar óptima en el ternario y la influencia de algunos de los parámetros del ternario y del  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  en la eficiencia de la celda. Se evalúa, además, el impacto de los defectos en las interfaces ETL/  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  y HTL (capa transportadora de huecos)/ $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ . Se obtuvo una eficiencia del 14 % para la celda optimizada con el  $\text{Cd}_{0.4}\text{Zn}_{0.6}\text{S}$  como ETL y  $\text{CuO}_2$  como HTL. Con los resultados aquí presentados se provee una guía para el diseño y la fabricación de este tipo de celdas en función de elevar la eficiencia y ahorrar tiempo y recursos.

**Palabras claves:**  $\text{Cd}_{1-x}\text{Zn}_x\text{S}$  , Celdas de  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$ ; estructura n-i-p; Capa transportadora de electrones.

**Mie 01 10:00-11:00 Next generation technologies for transparent Photovoltaics,  
Alejandro Pérez-Rodríguez<sup>1,2</sup>, Edgardo Saucedo<sup>3</sup>, Víctor Izquierdo-Roca<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Catalonia Institute for Energy Research (IREC), C. Jardins de les Dones de Negre 1, 08930 Barcelona, Spain

<sup>2</sup>IN2UB, Dept. d'Enginyeria Electrònica i Biomèdica, Universitat de Barcelona, C. Martí i Franquès 1,  
08028 Barcelona, Spain;

<sup>3</sup>Photovoltaic Group, Electronic Engineering Department, Polytechnic University of Catalonia, Campus Besòs - Building C - 4th Floor, Av. d'Eduard Maristany, 16, 08930 Barcelona

In the last years there is an increasing interest for the development of photovoltaic (PV) technologies with a high level of transparency in the visible region. Highly transparent PV represents a new paradigm that will allow opening and consolidating new solar markets that need to be developed for an increased PV deployment, with the aim to replace conventional fossil-fuel energy technologies. This includes different kinds of applications, as façade integrated PV, smart solar windows, automobile integrated PV, transparent electronic low power displays and multimedia mobile displays. In these applications, there is a strong need for reliable and efficient technologies with transparency levels higher than 50% in the visible region. In concrete, in the case of building related applications, PV is already recognised as one of the main technologies that will play a relevant role for the development of near-zero energy buildings. Transparent (in the visible) PV technologies would allow an easy integration of the PV devices in the windows, opening the path to a new generation of non-intrusive BIPV components. However, state of the art systems are still mainly based on the use of segmented PV elements including opaque regions with PV functionality, and transparency in the visible region is still limited to values in the 30% range, while many of the proposed solutions use still intrusive designs with strong visual impact for the users of the buildings.

This presentation will review the strategies for next generation highly transparent PV that are mainly based on the use of wavelength-selective technologies and luminescent solar concentrators. The presentation will describe different non-intrusive innovative PV window concepts that are being developed at IREC in the frame of the Tech4Win ([www.tech4win.eu](http://www.tech4win.eu)) and SolarWin (<https://physee.eu/solarwin/>) European projects. These include tandem-inspired device structures combining new UV and IR wavelength selective devices and luminescent-based solar windows incorporating advanced PV customized technologies specifically adapted to the luminescent emission. These approaches are based on the integration of chalcogenide, oxide and organic thin

film PV technologies. At a more fundamental level, the development of new device concepts involving low dimensionality structures is addressed in the new SENSATE European project that is being developed in cooperation between the UPC and IREC research groups. The potential of all these technologies for the development of next generation transparent PV will be discussed analyzing the technological challenges that need to be solved in each case for the development of reliable and highly transparent efficient devices.

**Mie 02 11:00-11:30 Fonones polaritónicos en agujeros estrechos rellenos con un material polar en régimen de acoplamiento ultra fuerte, Fernando de León Pérez**

Centro Universitario de la Defensa

Ctra. Huesca s/n, CP 50090, Zaragoza, España

Email: fdlp@unizar.es

Recientemente se ha reportado un acoplamiento ultra fuerte (USC, por sus siglas en inglés) entre los fotones con frecuencias en el infrarrojo medio, creados dentro de agujeros anulares ultra estrechos perforados en láminas delgadas de metal, y los fonones de un material polar que rellena los agujeros [1]. Se ha medido un desdoblamiento de las frecuencias polaritónicas igual al 50% de la frecuencia de resonancia. El régimen de USC es de especial interés para el estudio de la interacción de moléculas con la energía de punto cero, la magnificación de reacciones químicas y el desarrollo de nuevos dispositivos en el infrarrojo medio, entre otros potenciales usos [2].

En la charla describiremos los modelos simples que desarrollamos en la Ref. [1] para ajustar las ramas polaritónicas medidas experimentalmente. El modelo clásico para los fonones polaritónicos es presentado en forma de matriz 2x2, la cual mejora las prestaciones del modelo de los osciladores acoplados usado sistemáticamente para ajustar los espectros experimentales. El modelo cuántico de los polaritones es un Hamiltoniano tipo Hopfield [3], que permite estudiar tanto el régimen de USC como la energía de punto cero de los fonones polaritónicos.

**Referencias**

- [1] D. Yoo *et al.*, *Nat. Phot.* 2020 (aceptado); arXiv: 2003.00136.
- [2] A. F. Kockum *et al.*, *Nat. Rev. Phys.* **1**, 19 (2019).
- [3] C. Ciuti *et al.*, *Phys. Rev. B* **72**, 115303 (2005).

**Mie 03 11:30-12:00 Transferencia Radiativa de Calor en Medios Porosos Deformados, Jaime E. Pérez-Rodríguez, Angela Camacho de la Rosa y Raúl Esquivel Sirvent**

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, 04530 CDMX.

La transferencia radiativa de calor cobra particular interés a la nanoescala, ya que se dejan de cumplir los resultados clásicos como la ley de Stefan-Boltzman. En los últimos años han surgido una gran variedad de experimentos y sistemas para medir esta transferencia a la nanoescala. Un sistema que se utilizó consiste en una placa de SiC con poros cilíndricos distribuidos de manera uniforme. Los poros tienen la función de cambiar la superficie efectiva del SiC, disminuir su función dieléctrica cambiando la emisión térmica del material. En este trabajo, mostramos cómo se puede modular la emisión térmica por medio de un esfuerzo mecánico del medio poroso. El esfuerzo deforma el perfil circular del poro a un perfil elipsoidal. Si bien el volumen que ocupan los poros es el mismo el cambiar la sección transversal cambia la transferencia de calor e introduce una anisotropía.

Para realizar el cálculo introducimos el concepto de depolarización térmica así como un esquema de homogenización para poros no cilíndricos. El efecto de la transferencia de calor como función de la excentricidad de los poros será discutida.



**Mie 04 12:00-12:30 Caos autónomo en un dímero polaritónico, Ricardo Ruiz Sánchez, Raúl Rechtman, Yuri G. Rubo**

*Instituto de Energías Renovables, UNAM, Temixco, Mor. 62580*

El estudio del acoplamiento fuerte de la luz con excitones en un semiconductor fue iniciado por Solomon Pekar en 1957 [1], quien ha hecho la predicción teórica de ondas adicionales de la luz en semiconductores cerca de la resonancia de la energía de los fotones con la energía de los excitones. El excitó-polaritón (polaritones) es el nombre moderno de los cuantos de estas ondas adicionales. A partir de esto, las investigaciones de los polaritones se intensificaron por que sus propiedades son bastante interesantes, y combinan las propiedades de la luz y materia. En particular, la masa efectiva de los polaritones es muy pequeña, y permite esperar la condensación de polaritones en temperaturas elevadas, hasta la temperatura ambiente. En las últimas dos décadas, estos estudios aumentaron gracias al avance de las técnicas de crecimiento y control de las estructuras semiconductoras. La condensación polaritones fue observada por la primera vez en microcavidades semiconductoras en 2006 [2]. En el cual, el desarrollo experimental [3,4] ha tenido un impacto importante en la fabricación de microcavidades e insertar en ellas medios activos (puntos, hilos o pozos cuánticos) con la finalidad de estudiar la interacción entre excitaciones de la materia (excitones) y la luz.

En este trabajo, estudiamos los condensados polaritónicos basado en la ecuación de Gross-Pitaevskii generalizado para el parámetro de orden, en el que describimos la dinámica del condensado usando técnicas de dinámica no-línea. Demostramos que el condensado presenta secuencias de bifurcaciones presentes como función de la potencia de bombeo y de los parámetros que caracterizan al sistema. Demostramos la formación de caos y atractores extraños para los parámetros de orden del sistema de dos condensados de excitón-polaritón acoplados por el efecto túnel. Para obtener estos resultados calculamos el máximo exponente de Lyapunov. Encontramos que para algunos valores de los parámetros, la ruta de bifurcación es más compleja y el atractor extraño puede coexistir con el láser estable de punto fijo. Finalmente, se menciona como se refleja esta dinámica en el espectro de emisión de la luz desde la microcavidad semiconductor. Más detalles de este trabajo se puede encontrar en [5].

- [1] S. I. Pekar, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **33**, 1022 (1957) [Sov. Phys. JETP **6**, 785 (1958)].
- [2] J. Kasprzak, *et al.*, Nature **443**, 409–414 (2006).
- [3] H. Ohadi et al., Phys. Rev. X **5**, 031002 (2015); Phys. Rev. Lett. **116**, 106403 (2016).
- [4] A. Dreismann et al., Nature Mater. **15**, 1074-1078 (2016).
- [5] R. Ruiz-Sánchez, R. Rechtman, and Y. G. Rubo, Phys.Rev.B **101**, 155305 (2020).

**Mie 05 12:30-13:00 Biased gap edges in quantum-topological multilayers,  
Guilherme Sipahi<sup>a</sup>, Tiago de Campos<sup>a</sup>, Marcel Alejandro Toloza-Sandoval<sup>b</sup> y L.  
Diago-Cisneros<sup>acd\*</sup>**

- a) Universidade de São Paulo, Instituto de Física de São Carlos.
- b) Instituto de Física, Universidade Federal da Bahia.
- c) Facultad de Física, Universidad de La Habana, Cuba.
- d) Departamento de Física y Matemáticas, Universidad Iberoamericana, México.

\* <http://orcid.org/0000-0003-0569-0162/>; E-mail: [ldiago@fisica.uh.cu](mailto:ldiago@fisica.uh.cu);  
[leovildo.diago@ibero.mx](mailto:leovildo.diago@ibero.mx)

We are studying broken gap quantum wells because they can present the band inversion regime that leads to topological phase transition [1]. In special, we are concerned about the topologically protected helical edge states. But also, more recently, it was shown that superconductivity can be induced in these edge states which is ideal to Majorana fermion applications. In this talk it is shown the theoretical prediction of the supercurrent oscillations in the presence of an external magnetic flux in two cases: i) for bulk states and for ii) edge states. It is shown the actual measurements of such oscillations which matches very well the theoretical predictions. Furthermore, these broken gap heterojunctions are also worth studying for their applications in electronics, opto-electronics, as well as spintronics devices.

[1] T. Campos, M. A. Toloza-Sandoval, L. Diago-Cisneros and, G. M. Sipahi, *J. Phys.: Condens. Matter* **31**, 495501 (2019).



## **TÍTULOS Y RESÚMENES DE LAS CHARLAS PUESTAS EN LA NUBE**

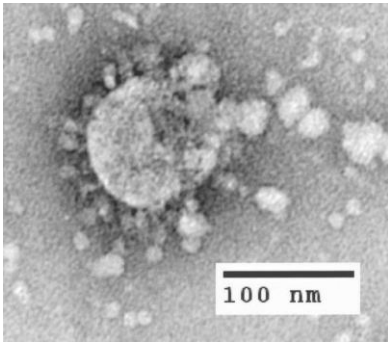


### **COVID 19: no solo el tamaño importa (scaling), Oscar Sotolongo Costa**

Cátedra de sistemas complejos “Henri Poincaré”. Universidad de La Habana.  
Habana 10400, Cuba.

Allometric properties of COVID-19 infection are revealed. Scaling in the distribution of infected patients by country daily is also seen and the reasons are discussed in an entropic framework. Scaling is revealed as a property of COVID-19 infection also.

En este trabajo se ponen de manifiesto propiedades alométricas de la pandemia de COVID-19. Se investigan las propiedades de ley de escala en la distribución de la cantidad diaria de enfermos en los distintos países cada día. Se discute, con un enfoque entrópico, las propiedades de dicha distribución. En este trabajo se revela la existencia de leyes de escala es, también una propiedad de la pandemia de COVID-19.



**¿Por qué la bicapa de grafeno es un material termoeléctrico? , J.A. Briones-Torres<sup>1</sup>, R. Pérez-Álvarez<sup>1,2</sup>, S. Molina-Valdovinos<sup>1</sup>, I. Rodríguez Vargas<sup>1</sup>**

<sup>1</sup>Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Carretera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, Ejido La Escondida, 98160 Zacatecas, Zac., Mexico.

<sup>2</sup>Centro de Investigación en Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, 622009 Cuernavaca, Morelos, México.

**Palabras Clave:** Termoelectricidad, Resonancias Fano, Bicapa de grafeno.

En la actualidad para mejorar el rendimiento termoeléctrico se hace uso de estructuras de baja dimensión entre las que se encuentran superredes de puntos cuánticos, de alambres y de pozos basadas en materiales bidimensionales, esto se conoce como termoelectricidad de baja dimensión. Uno de los materiales bidimensionales con mucho futuro en la nanotecnología es la bicapa de grafeno. Presentaremos las propiedades de transporte y termoeléctricas de la bicapa de grafeno en sistemas de una y dos barreras para demostrar que las resonancias Fano hacen de la bicapa de grafeno un buen material termoeléctrico.

**Propagación de ondas transversalmente polarizadas en laminados piezocompuestos considerando contacto imperfecto en las interfaces, Joanka Hernández Cabanas, José Antonio Otero Hernández y Guillermo Monsivais Galindo**

(UNAM-TEC de Monterrey)

Se presenta un modelo dinámico para estudiar ondas transversales verticalmente polarizada (SV) en piezocompuestos laminados. Se consideran imperfecciones mecánicas en la interfaz entre dos materiales o fases que constituyen un medio heterogéneo. El comportamiento de las ondas SV se analiza considerando dos tipos de contacto imperfecto. Por un lado, el contacto imperfecto se tiene en cuenta mediante el movimiento de capas en el dirección perpendicular a la interfaz. Por otro lado, el contacto imperfecto se considera a través del movimiento de capas en una dirección tangencial a la interfaz. Las capas están acopladas a través de un resorte que obedece a la ley de Hooke. En ambos escenarios, el grado de imperfección se incorpora a través de una constante de imperfección elástica. El esfuerzo es proporcional a el salto del vector de desplazamiento en la interfaz y a la magnitud de la constante elástica. Se obtienen relaciones de dispersión para diferentes fracciones volumétricas de la fase piezoeléctrica y diferentes grados de imperfección. Se observan regiones de cruce evitable en las curvas de dispersión. Los cambios en los modos de oscilación se pueden identificar a través de los desplazamientos en estas regiones. Desplazamientos que son utilizados para describir la naturaleza de las oscilaciones en algunos casos. Además, el caso de contacto perfecto se reproduce resolviendo el modelo propuesto para valores grandes de la constante de elasticidad del resorte, mostrando una buena concordancia cuando se compara con las soluciones a los modelos propuestos por otros autores. Finalmente se presenta una comparación entre la teoría y los resultados experimentales para una constante de acoplamiento electromecánico.



**Effect of [Cu]/[Sb] ratio on the physical properties of CuSbS<sub>2</sub> thin films developed from thermally evaporated CuS/Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> stack, R .G. Sotelo Marquina <sup>a, b</sup>, T. G. Sánchez <sup>b</sup>, E. Regalado-Perez<sup>b</sup>, N.R Mathews <sup>b</sup>, Joel Pantoja Enríquez <sup>a</sup>, X. Mathew <sup>b\*</sup>**

<sup>a</sup> *Instituto de Investigación e Innovación en energías Renovables Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas, Libramiento Norte Poniente No.1150, Colonia Potinaspak, Tuxtla Gutiérrez Chiapas. CP29818.*

<sup>b</sup> *Instituto de Energía Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos, 62580, México*

\* Author for correspondence: nrm@ier.unam.mx

**Abstract:**

In this work, we report the experimental development and theoretical evaluation of phase-pure CuSbS<sub>2</sub> thin films with potential applications in photovoltaics. Binary stacks of CuS/Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> thin films were deposited by thermal evaporation on to glass substrates using CuS and Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> powders. Optimal control of [Cu]/[Sb] ratio of the CuS/Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> stacks allowed to tune the doping concentration, electron affinity, and bandgap of the processed thin films. Device simulations were performed to correlate the experimental parameters of CuS/Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> thin films with the performance of SLG/Mo/CuSbS<sub>2</sub>/CdS/ZnO/AZO/Al devices. Here we propose a base solar cell model to understand the state-of-the-art CuSbS<sub>2</sub> devices with conversion efficiencies over 3%. Our device model assumes carrier recombination via *defects* at both *CdS/CuSbS<sub>2</sub>* interface and *CuSbS<sub>2</sub> bulk*, suggesting that the experimentally reported low values of Voc can be attributed to two factors: (i) the *interface* defects at the *buffer/absorber* and (ii) the *doping concentration in CuSbS<sub>2</sub> layer*. In particular, the concentration of shallow acceptors (N<sub>A</sub>) in CuSbS<sub>2</sub> bulk has a crucial effect in the power conversion efficiency (PCE), which increases from 2.97% to 4.45% with *increasing* N<sub>A</sub> from 4.12x10<sup>17</sup> (Cu/Sb=0.25) to 8.50x10<sup>17</sup> cm<sup>-3</sup> (Cu/Sb=0.93), as consequence of favorable combination of doping and band alignment. These results offer new opportunities in CuSbS<sub>2</sub> research to increase Voc and PCE through further improved doping procedures and *interface engineering*.

**Acknowledgments**

This work at IER-UNAM was partially supported PAPIIT IN107815, IN104518. The infrastructure developed from these projects were used for the thermal annealing of the samples. Authors acknowledge Maria Luisa Ramon Garcia for XRD; Gildardo Casarrubias Segura and José Campos Alvarez for general help in the laboratory.

**Phase pure CuSbS<sub>2</sub> thin films by heat treatment of electrodeposited Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/Cu layers, R.G. Avilez García<sup>1</sup>, J. Pantoja<sup>1</sup>, Andrea Cerdán-Pasarán<sup>2</sup>, E. A. Rueda Perez<sup>4</sup>, Mou Pal<sup>3</sup>, N.R. Mathews<sup>4\*</sup>**

<sup>1</sup>Instituto de Investigación e Innovación en energías Renovables Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas, Libramiento Norte Poniente No.1150, Colonia Potinaspak, Tuxtla Gutiérrez Chiapas. CP29818.

<sup>2</sup>Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, San Nicolás de los Garza, Nuevo León C.P. 66455, México.

<sup>3</sup>Instituto de Física, BUAP, Av. San Claudio y Blvd. 18 Sur Col. San Manuel, Ciudad Universitaria, C.P. 72570 Puebla, México.

<sup>4</sup>Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos 62580, México.

\*Contact E-mail: nrm@ier.unam.mx

### **Abstract**

Thin films of Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/Cu multilayer were fabricated by electrodeposition. For the thin films of Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub> the deposition potential ( $V_{on}$ ) was applied for 10s which was followed by a dissolution potentials ( $V_{off}$ ) for 10s. The thickness of the film was controlled by the number of cycles, approximately 250 nm were deposited by pulse electrodeposition from a bath containing 0.5 mM SbCl<sub>3</sub> and 0.25 mM Na<sub>2</sub>S<sub>2</sub>O<sub>3</sub> precursors onto which Cu was electrodeposited. In order to optimize the formation of pure chalcostibite phase of CuSbS<sub>2</sub>, the thickness of Cu layer was varied from 55 nm to 130 nm. The Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>/Cu multilayer was heat treated at 250°C under N<sub>2</sub>/S atmosphere for 30 min for its conversion into CuSbS<sub>2</sub> and to enhance the crystallinity. The structural, morphological and the optical characterizations of the as deposited and annealed films were carried out using X-ray, Raman, SEM, spectroscopy and UV-VIS transmittance spectroscopy. XRD spectra show orthorhombic phase of CuSbS<sub>2</sub>, it was confirmed by raman analysis. The optical characterization demonstrated a band gap of 1.45 eV. SEM image demonstrated a homogeneous thin film with spherical grains. Furthermore, the results showed that the CuSbS<sub>2</sub> thin film is photosensitive and p-type.

### **Acknowledgments**

This work at IER-UNAM was partially supported PAPIIT IN107815, IN104518. The infrastructure developed from these projects were used for the thermal annealing of the samples. Authors acknowledge Patricia Eugenia Altuzar Coello for XRD; Gildardo Casarrubias Segura and José Campos Alvarez for general help in the laboratory, Rogelio Moran Elvira for SEM measurements.

**Electrodeposition of antimony sulfide selenide thin films: effect of the deposition potential, E.A. Rueda Pérez<sup>1</sup>, Andrea Cerdán-Pasarán<sup>2</sup>, R.G. Avilez García <sup>1</sup>, N.R. Mathews<sup>1\*</sup>**

<sup>1</sup>Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos 62580, México.

<sup>2</sup>Facultad de Ciencias Químicas, Universidad Autónoma de Nuevo León, San Nicolás de los Garza, Nuevo León C.P. 66455, México.

Contact E-mail: \* [nrm@ier.unam.mx](mailto:nrm@ier.unam.mx)

$Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$  is presented as a promising light absorber material because of nontoxicity, abundance of constituent elements and suitable physical parameters for applications in solar cells. To date, quite a few attempts have been reported in the materials synthesis of  $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$  which are mainly by physical methods. The chemical methods of synthesis in general are of low cost, hence an alternative is the development of these films by electrodeposition. In this work, we present the effect of deposition potential on the formation of antimony sulfide-selenide thin films and the structural and optoelectronic properties of these films. For this the films were deposited at three different potentials, -0.6V, -0.66V and -0.72V vs saturated calomel electrode. The deposition bath consisted of 18 mM of  $Na_2S_2O_3$ , 1.5 mM of  $SbCl_3$  and 0.8 mM of  $H_2SeO_3$  and the deposition time was controlled to obtain the same thickness. The amorphous  $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$  obtained by electrodeposition was heat treated at 350°C under  $N_2/S$  atmosphere for 30 minutes to enhance the crystallinity. After this process we obtained crystalline thin films of approximately 350 nm. The Raman spectroscopy and X-ray characterization showed the formation of the solid solution  $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$  with average crystal size of 16 nm. The optical characterization demonstrated a tuned band gap between 1.55 eV- 1.4 eV. The photoresponse study showed that the  $Sb_2(S_xSe_{1-x})_3$  thin films were photosensitive.

### Acknowledgments

This work at IER-UNAM was partially supported PAPIIT IN107815, IN104518. The infrastructure developed from these projects were used for the thermal annealing of the samples. Authors acknowledge Patricia Eugenia Altuzar Coello for XRD; Gildardo Casarrubias Segura and José Campos Alvarez for general help in the laboratory.

**Post-deposition thermal processing of  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  thin films to obtain the solid solution  $\text{Sb}_2\text{Se}_{3-x}\text{S}_x$ , O. Flores-Ventura<sup>1</sup>, Maykel Courel<sup>2</sup>, N. R. Mathews<sup>1</sup>, T.G. Sanchez<sup>3</sup>, X. Mathew<sup>1,\*</sup>**

<sup>1</sup>Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos 62580, Mexico

<sup>2</sup> Centro Universitario de los Valles, Universidad de Guadalajara, C.P 46600, Ameca, Jalisco, Mexico.

<sup>3</sup>Centro de Investigación en Ingeniería y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México.

The materials  $\text{Sb}_2\text{Se}_3$  and  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  have gained attention for photovoltaic applications due to their high optical absorption coefficient ( $\sim 10^5 \text{ cm}^{-1}$ ) and direct band gap in the range of 1-1.2 eV and 1.7-2.0 eV, respectively. In addition, these materials are based on earth-abundant and no-toxic elements. In this work, we present results on the processing of  $\text{Sb}_2\text{Se}_{3-x}\text{S}_x$  (where  $0 < x < 3$ ) thin films starting from the deposition of the binary  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  by thermal evaporation. Later, the binary films were submitted to a thermal treatment in inert ambient in presence of selenium and sulfur vapor, with the purpose of incorporating selenium into the structure and thus forming the ternary compound. It is found that with the variation of temperature and pressure during thermal treatment, the amount of selenium incorporated into the  $\text{Sb}_2\text{S}_3$  film can be controlled, resulting in an optical band-gap in the range of 1.1-1.7 eV, depends on the composition. Furthermore, it is observed that the incorporation of Se improves the structural properties as well as the conductivity of material. We discuss the thermal processing and the material properties of the obtained ternary film annealed under different conditions of temperature, pressure, and amount of Se.

**Keywords:**  $\text{Sb}_2\text{S}_3$ ,  $\text{Sb}_2\text{Se}_{3-x}\text{S}_x$ , Selenization

**Acknowledgements:** This work was partially supported by the project PAPIIT-IN 102718 and IN IN104518. Authors acknowledge to M.L. Ramón-García, Gildardo Casarrubias Segura, Rogelio Moran Elvira and José Campos Alvarez for technical support.

**Resultados preliminares para los niveles de impurezas de silicio en GaAs 2D: Un primer estudio de primeros principios, J. C. Martínez-Orozco<sup>1</sup>, J. D. Correa<sup>2</sup>, M. E. Mora-Ramos<sup>3</sup>, C. A. Duque<sup>4</sup>.**

<sup>1</sup>*Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, Calzada Solidaridad esquina con Paseo la Bufa S/N, C.P. 98060, Zacatecas, Zac. México.*

<sup>2</sup>*Facultad de Ciencias Básicas, Universidad de Medellín, Medellín, Colombia.*

<sup>3</sup>*Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, CP 62209, Cuernavaca, Morelos, México*

<sup>4</sup>*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.*

Los sistemas bidimensionales son un campo con mucha actividad en las últimas décadas, aunque estos fueron reportados teóricamente por P.R. Wallace desde 1947 y hay muchos trabajos posteriores, sin embargo, fue en el 2004 que Andre Gaim y Konstantin Novoselov lograron exfoliar una lamina de grafito que les valió el nobel 2010 “por sus innovadores experimentos relacionados al material 2D-Grafeno”. Sin lugar a duda el impacto del descubrimiento de los sistemas 2D como el grafeno ha propiciado las investigaciones tanto teóricas como experimentales de una gran cantidad de materiales como el Siliceno, Boreno, Arseneno, fosforeno, solo por mencionar algunos de los más emblemáticos. En esta línea de ideas en este trabajo presentamos algunos resultados preliminares de la estructura de bandas, la densidad de estados y la parte imaginaria de la constante dieléctrica de un sistema 2D de GaAs, ya que como sabemos el Silicio tiene una naturaleza anfotérica en el GaAs, lo que significa que en función de cual átomo sustituya esta puede ser una impureza tipo n o tipo p y al realizar los cálculos en la teoría del funcional de la densidad encontramos que efectivamente aparece los niveles cerca de la banda de conducción (valencia) si la impureza es tipo n (tipo p), se modifica la densidad de estados debido a la impureza y se hace una comparación de la parte imaginaria de la constante dieléctrica en los tres casos.

**Ondas de Calor en medios periódicos multicapa, Angela Camacho de la Rosa,  
David Becerril, Guadalupe Gómez Farfán y Raúl Esquivel Sirvent**

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, 04530 CDMX.

En este trabajo se utilizó la Ecuación de Cattaneo-Vernotte (CV) como modelo de conducción de calor en un sistema multicapa. Esta ecuación supone que la velocidad de propagación de las perturbaciones térmicas es finita, a diferencia de lo que predice la Ley de Fourier. Se concluye que la Ecuación CV admite soluciones de tipo ondulatorio, por lo que el problema de conducción de calor se identifica con el de *ondas térmicas* propagándose en un sistema periódico. En este trabajo se utilizó la Ecuación de Cattaneo-Vernotte (CV) como modelo de conducción de calor en un sistema multicapa. Esta ecuación supone que la velocidad de propagación de las perturbaciones térmicas es finita, a diferencia de lo que predice la Ley de Fourier. Se concluye que la Ecuación CV admite soluciones de tipo ondulatorio, por lo que el problema de conducción de calor se identifica con el de *ondas térmicas* propagándose en un sistema periódico. A continuación se usa el Teorema de Floquet en conexión con el formalismo de Matriz de Transferencia Asociada para construir la estructura de bandas para conducción térmica, e introducir el concepto de cristal térmico. Estos resultados contribuyen en la interpretación física de dichas estructuras y en la construcción de sistemas accesibles experimentalmente, en los que a partir de modificaciones en la periodicidad y geometría es posible modular las propiedades térmicas.

Estos resultados contribuyen en la interpretación física de dichas estructuras y en la construcción de sistemas accesibles experimentalmente, en los que a partir de modificaciones en la periodicidad y geometría es posible modular las propiedades térmicas.

**Excitación indirecta de magnetoexcitones en un metamaterial de metal y pozo cuántico semiconductor vía el efecto magneto-óptico, P. L. Valdés-Negrin<sup>1</sup>, F. Pérez-Rodríguez<sup>1</sup>**

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

Se estudia teóricamente el acoplamiento de magnetoexcitones con los modos de un metamaterial hiperbólico. Este acoplamiento es descrito en la aproximación de Stahl-Balslev, utilizando el formalismo de la amplitud de onda coherente. El metal bajo la acción de un campo magnético es estudiado clásicamente. Se presenta la solución del sistema de ecuaciones para la amplitud de onda coherente y los campos electromagnéticos. Se ha utilizado el método de matriz de transferencia 4x4 para obtener los espectros ópticos de reflexión, transmisión y absorción para un sistema periódico de 7 celdas unitarias, compuestas de metal (Al)-semiconductor con pozo cuántico ( $\text{In}_{0.18}\text{Ga}_{0.82}\text{As}/\text{GaAs}$ ), embebido en aire. Se ha analizado la estructura resonante de los espectros ópticos, considerando incidencia normal. Se ha tenido en cuenta el efecto magneto-óptico resultante de introducir un campo magnético estático en el metal y el acoplamiento de los magnetoexcitones con los modos del metamaterial hiperbólico. Debido al efecto magneto-óptico en el metal, luz incidente con polarización en el eje “y”, se acopla fuertemente, no solo con el magnetoexcitón del eje “y”, sino también con el magnetoexcitón del eje “x”.

## Propiedades estructurales del Solvente Eutéctico Profundo $ZnCl_2:ChCl$ (2:1) a partir de cálculos de primeros principios. Edgar Ivan Valerio Martínez, Josué Mota Morales y Cristy Leonor Azanza Ricardo

En el marco de la *Química Verde*, combinado con la propuesta de una *Economía Circular*, se busca reducir la emisión de compuestos orgánicos volátiles en la industria, a través de la sustitución de Solventes Orgánicos (SO) por Solventes Eutécticos profundos (DES). Dentro de la gran cantidad de DES, la combinación sal de amonio cuaternario Cloruro de Colina  $C_5H_{14}ClNO$  más el ácido de Lewis Cloruro de Zinc  $ZnCl_2$  en proporción molar 1:2, se ha utilizado con éxito en una variedad de reacciones químicas y síntesis de materiales [1].

El DES  $ChCl + ZnCl_2$  por naturaleza posee un alto índice de viscosidad, debido a que el líquido contiene iones grandes con un número insignificante de agujeros lo suficientemente grandes como para permitir el movimiento de iones [2]. Debido a ello resulta complicado la obtención de sus propiedades químicas y físicas, por cualquiera de las técnicas experimentales no invasivas conocidas. Lo anterior coloca al DES dentro de la categoría de problemas químicos intratables o muy complejos de analizar, desde el punto de vista experimental. Con el objetivo de encontrar soluciones a este tipo de problemas, la Química Cuántica Computacional (QQC) aporta una serie de herramientas, que permiten simular y extraer información sobre una molécula cualquiera, incluso antes de haber realizado el experimento. Aproximando la solución de la Ecuación de Schrödinger Independiente del Tiempo (ESIT), a través del método de la Teoría Funcional de la Densidad (DFT) y buscando un mayor control sobre la correlación electrónica, se propone usar funcionales Híbridos Meta-GGA, con el objetivo de navegar con mayor rapidez y eficacia a través de la hiper Superficie de Energía Potencial (PES) [3], creada por las interacciones moleculares, para encontrar mínimos de energía local, donde la disposición geométrica de los componentes del DES, sea equivalente o igual a la que se observa en la realidad.

En el presente trabajo se muestran los principales grupos estructurales de mínima energía local, encontrados por las diferentes simulaciones realizadas y caracterizadas por propiedades en común. A través de un criterio energético, se propone el camino de formación del DES y con ayuda de la aproximación de Maxwell-Boltzmann, se seleccionan las que tienen una mayor probabilidad de existir en la muestra, a partir de ellas se calcula una combinación de espectros teóricos FTIR, para validarlo con datos experimentales reportados en literatura. Cuando se concluye la etapa de validación, es posible extraer propiedades físicas y químicas de la misma.

### Referencias.

- [1] R. C. Morales, V. Tambyrajah, P. R. Jenkins, D. L. Davies and A. P. Abbott, *Chemical communications*, 2004, 158–159.
- [2] A. P. Abbott, G. Capper, D. L. Davies and R. Rasheed, *Inorganic chemistry*, 2004, 43, 3447–3452
- [3] Y. Zhao and D. G. Truhlar, *Theoretical Chemistry Accounts*, 2008, 120, 215–241.



**Estudios preliminares de la influencia de la tensión en los niveles de energía en puntos cuánticos core-shell y core-shell-shell II-VI, K. A. Rodríguez-Magdaleno<sup>a</sup>, F. Urgan<sup>b</sup>, R. Pérez Álvarez<sup>c,d</sup>, J. C., Martínez-Orozco<sup>a</sup>**

<sup>a</sup>Unidad Académica de Física, Universidad Autónoma de Zacatecas, <sup>b</sup>Faculty of Technology, Department of Optical Engineering, Sivas Cumhuriyet University, <sup>c</sup> Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, <sup>d</sup> Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas

\*[karelyrod@uaz.edu.mx](mailto:karelyrod@uaz.edu.mx)

La diferencia de las constantes de red en los compuestos semiconductores II-VI los hacen tener propiedades electrónicas y ópticas interesantes para su aplicación en dispositivos optoelectrónicos, la búsqueda de estudiar sistemas de baja dimensión como los pozos, hilos y puntos cuánticos utilizando estos semiconductores en su composición es un tema vigente hoy en día. Por ello, en este trabajo se presentan los resultados preliminares de los niveles de energía de la banda de conducción en puntos cuánticos core-shell y core-shell-shell compuestos por los materiales semiconductores CdTe/ZnSe y CdTe/ZnSe/ZnS bajo la influencia de la tensión como función de los anchos del core y de los shells. Los resultados muestran que se pueden calcular propiedades ópticas interesantes entre la transición principal 1s-1p.

***Zitterbewegung Pseudoespinorial en grafeno monocapa, Eduardo Javier Serna Duarte, Rolando Pérez Álvarez, Leovildo Diago Cisneros***

En este trabajo se presenta un dispositivo espintrónico novedoso basado en una monocapa de grafeno (MLG) que se encuentra en un sustrato de  $\text{SiO}_2$  y una cobertura de nitruro de boro hexagonal (hnBN). Con ayuda de este sistema se describe la dinámica de fermiones de Dirac no-relativistas, representados por un paquete de ondas gaussiano (GWP) que se encuentra confinado electrostáticamente a una nanocinta cuántica cuasi-unidimensional (Q1D) de MLG, que asumimos litográficamente impresa desde un gas bi-dimensional de MLG. La evolución temporal en la región de espacio libre, resultado de la difusión cuántica del GWP en la superficie de una MLG, lo lleva a esparcirse y dividirse en un par de sub-GWP, que viajan en sentidos opuestos respecto a la referencia, como se esperaba.

Para la descripción de los efectos relacionados al espín en este dispositivo, se ha elaborado un procedimiento teórico-numérico que se basa principalmente en la novedosa inclusión explícita de los huecos pesados, en el término del hamiltoniano efectivo, que describe la interacción espín-órbita tipo Rashba (SOI-R). Nuestro modelo es tratado en un esquema de diferencias finitas, dentro de la aproximación de Goldberg, para la descripción del operador de evolución temporal del GWP.

Por primera vez en la literatura --hasta donde conocemos--, se reportan evidencias (teóricas en este caso) de oscilaciones trepidantes anti-fase en la evolución temporal de la densidad de probabilidad para cada estado de la sub-red, que hemos nombrado como: Efecto Zitterbewegung Pseudoespinorial (PZBE), en remembranza a las tempranas elucidaciones de Schrödinger sobre el Efecto Zitterbewegung (ZBE) original, referido a las oscilaciones intensas de la posición de electrones relativistas. El PZBE tiene un carácter transiente robusto, con un tiempo de decaimiento de del orden de los femtosegundos, lo cual se ajusta muy bien a mediciones experimentales sobre el ZBE tradicional. Varias características del PZBE son sintonizables, incluso hasta desvanecerse completamente en la vecindad de los Puntos de Dirac, igualmente como una configuración del pseudoespín simétrica. También notamos que esta sintonización del PZBE afecta a los resultados observables del SOI-R, mostrando una relación directa.

Para el dispositivo Q1D de MLG, observamos evidencias del tunelaje de Klein, como ya se conocía} y encontramos inesperadamente manifestaciones del tunelaje anti-Klein, el cual sólo se ha reportado para el grafeno bi-capa bajo SOI-R sintonizable.

Finalmente, se presenta en el cuerpo de la tesis una sección crucial, referente al MLG bi-dimensional, donde el GWP evoluciona simultáneamente en 2 dimensiones espaciales y en el tiempo. A ese caso, lo denominamos 2D+1; 2 variables espaciales y 1 temporal. En esa sección, nos acercamos a un auténtico y novedoso modelo teórico, cuyo reto prominente, deriva de las complicaciones que surgen del nuevo grado de libertad espacial (en el plano del MLG). Lo anterior conduce a dificultades teóricas mayores, a la hora de proponer el hamiltoniano efectivo

adecuado --particularmente el término SOI-R de huecos--, junto a la descripción de sus correspondientes operadores de segundo y tercer órdenes, en diferencias finitas. Desde el punto de vista numérico, la nueva malla en diferencias finitas del problema 2D+1, está asociada a matrices cuadradas de rango  $N = 250\ 000$ , cuya estructura de bandas y extraña composición, exigen técnicas de super-cómputo, para la obtención de los auto-valores.

**Tutorial: Groups, Representations and Homomorphisms: a birds-eye view on  
Symmetries in Condensed Matter, Guilherme Sipahi**

In this tutorial I will navigate through some of the most important definitions and theorems of Group Theory, briefly presenting the concepts of groups, conjugation and classes, showing the connection of the more general Group Theory to the Representation Theory. I will also discuss the concept of homomorphism and how this concept helps to simplify very complicated problems by dealing with symmetry discovery and simplified functions.

I will finish by doing simple examples extracted from the most known sources of the field.

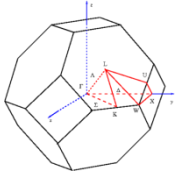
**DÉCIMO CUARTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR  
SEPTIEMBRE 28-30, 2020**

**De la Nanotecnología a los nano robots, José Manuel Nieto Jalil, Ricardo  
Betancourt Riera y Rene Betancourt Riera**

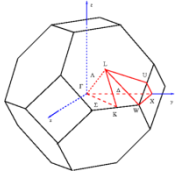
## Cómo citar los trabajos de este Taller con el sistema BiBTeX

A continuación un ejemplo de cómo se puede citar un trabajo a este Taller mediante el sistema BiBTeX.

```
@CONFERENCE{KARM-FU-RPA-JCMO-XIV-Workshop,  
  author=" K. A. Rodríguez-Magdaleno, F. Ugan, R. Pérez Álvarez, J. C., Martínez-Orozco ",  
  title="Estudios preliminares de la influencia de la tensión en los niveles de energía en puntos  
cuánticos core-shell y core-shell-shell II-VI ",  
  pages="73",  
  booktitle="Book of Abstracts of the XIV Workshop on Physics of Condensed and Molecular  
Matter",  
  year="2020",  
  editor="R. Pérez Álvarez",  
  organization="Universidad Autónoma del Estado de Morelos",  
  publisher="Universidad Autónoma del Estado de Morelos",  
  address="Ave. Universidad 1001, Cuernavaca, Morelos, M\exico",  
  month="September"  
  note="September 28-30 2020, Mexico",  
  url=" http://www.fc.uaem.mx/~tallerfmcm/"  
}
```



**DÉCIMO CUARTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR**  
**Cuernavaca, 28-30 de septiembre de 2020**



# DÉCIMO CUARTO TALLER DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA Y MOLECULAR

Cuernavaca, 28-30 de septiembre de 2020