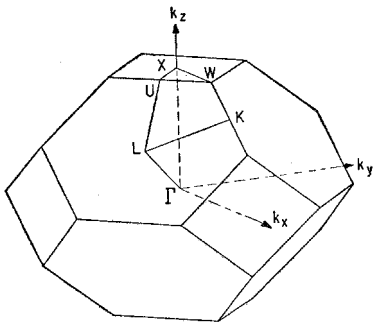




Universidad Autónoma del Estado de Morelos  
Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y  
Aplicadas

Centro de Investigación en Ciencias

# XX Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular. LIBRO DE RESUMENES.



22-24 / 06 / 2026

## COMITÉ ORGANIZADOR



**Dr. Rolando Pérez  
Álvarez**

rpa@uaem.mx



**Dr. Maykel Courel  
Piedrahita**

maykelcourel@gmail.com



**Dr. José A. Otero  
Hernández**

j.a.otero@itesm.mx



**Dra. Maria De  
Lourdes Albor  
Aguilera**

mlalbor@ipn.mx



**Dr. Juan Manuel  
Eugenio Ramirez  
De Arellano Niño  
Rincón**

jramirezdearellano@tec.mx



**Dr. Isaac Rodríguez  
Vargas**

isaac@uaz.edu.mx



**Dr. Outmane  
Oubram**

oubram@uaem.mx



**Ing. Marco Huerta**

hmarco@uaem.mx

**LUNES 22 DE JUNIO. SESIÓN PRESENCIAL DE FÍSICA DE LA MATERIA  
CONDENSADA.**

**Preside la sesión de la mañana: Dra. Tania Elizabeth Soto, Dr. Isaac Rodríguez-Vargas**

10:00-10:05	INAUGURACIÓN	
CONFERENCIA PLENARIA		
10:05-11:00	<i>Replicación de la física del grafeno bicapa rotado por ángulos mágicos mediante AsGa sometido a una superred de compuertas</i>	Pierre Pantaleón, Zhen Zhan, <b><u>Gerardo G. Naumis</u></b>
CONFERENCIAS		
<b>11:00-11:30</b>	<i>Patron de líneas nodales anómalo en el comportamiento vibracional de una placa metálica rectangular</i>	<b><u>Guillermo Monsivais Galindo</u></b> , Luis Gutiérrez, Alejandro Morales, F. Ramírez-Ramírez, José A. Otero.
11:30-11:45	<i>Ingeniería de paredes de dominio topológicas mediante campos magnéticos no uniformes</i>	<b><u>Carlos Ramírez Ramos</u></b> , Ricardo Yael Díaz Bonifaz
11:45-12:00	<i>Polarización de valles y espín en una barrera magnética basada en una monocapa de <math>1T'</math>-MoS<sub>2</sub></i>	<b><u>J.G. Rojas-Briseño</u></b> , A. Astráin-Ortega, Y.Y. Huamani-Tapia, S. Molina-Valdovinos, I. Rodríguez-Vargas
<b>12:00-12:30</b>	<i>Antiresonancias de las escaleras de Wannier-Stark en cadenas de Su-Schrieffer-Heeger</i>	<b><u>Yonatan Betancur Ocampo</u></b> , Guillermo Monsivais
12:30-12:45	<i>Optimization of Thermoelectric Response in Fractal-Like Graphene Superlattices</i>	<b><u>Mohammed Miniya</u></b> , David Quesada Saliba, Outmane Oubram, Isaac Rodríguez-Varga, Yamilet Rodríguez-Lazcano
12:45-13:00	<i>Transporte balístico y efecto termoeléctrico en superredes tipo Gaussiana aplicadas a fosforeno</i>	<b><u>E.J. Guzmán</u></b> , O. Navarro, I. Rodríguez-Vargas
13:00 –16:00	RECESO	
<b>Preside la Sesión de la Tarde: Humberto Noverola-Gamas -Dr. Mohammed Miniya</b>		
CONFERENCIA PLENARIA		
16:00-17:00	<i>Homogenización de metamateriales magnetizables</i>	<b><u>W. Luis Mochán</u></b> , Merlyn J. Juárez-Gutiérrez
CONFERENCIAS		
<b>17:00-17:30</b>	<i>Efecto del dopaje con átomos de Ce y Ba sobre las propiedades estructurales y magnéticas de la doble perovskita Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub></i>	<b><u>Tania. E. Soto</u></b> , D. L. García Ruíz, Bertha-Oliva Aguilar, Joaquín de la Torre, O. Navarro Chávez
<b>17:30-18:00</b>	<i>Materiales biogénicos activados por plasma a presión atmosférica para el tratamiento de aguas residuales</i>	<b><u>Claudia Karina Zagal Padilla</u></b> , Sergio Alberto Gamboa Sánchez, Horacio Martínez Valencia
<b>18:00-18:30</b>	<i>Incremento de la temperatura de Curie para el compuesto Sr<sub>2</sub>FeMoO<sub>6</sub> dopado con La</i>	<b><u>F. Estrada</u></b> , O. Navarro

## LUNES 22 DE JUNIO. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES.

Preside la sesión: Dra. María de Lourdes Albor Aguilera

CONFERENCIA MAGISTRAL		
11:00 – 12:00	<i>Celdas solares de segunda generación: principales desafíos que enfrentan algunas de las tecnologías establecidas y emergentes</i>	E. Regalado Pérez, N.R. Mathews, <b><u>Xavier Mathew</u></b>
CONFERENCIAS PRESENCIALES		
12:00 – 12:20	<i>Flexible p-SnSe/n-SnSe<sub>2</sub> thin-film thermoelectric elements produced via vacuum thermal evaporation</i>	<b><u>Fabiola De Bray Sánchez</u></b> , M. T. S. Nair
12:20 – 12:40	<i>Impacto de la Ruta de Procesamiento Térmico en Celdas Solares de CdTe</i>	<b><u>Cesar Hernández Vasquez</u></b> , Uriel Ramírez Acosta, Michelle Atenea Llarena Tello, José Manuel Flores Marquez, Miguel Ángel González Trujillo, María de Lourdes Albor Aguilera
12:40 – 13:00	<i>Optimización Energética en la Germinación de Fresa Implementando Materiales Poliméricos a Base de Quitosano</i>	<b><u>Ingrid Daniela Cruz Mejía</u></b> , Christian Jiménez Campero, María de Lourdes Albor Aguilera
13:00 – 13:20	<i>Depósito por Baño Químico Termostático de CdS dopado con Ag: Análisis estructural por GIXRD</i>	<b><u>JM Flores-Márquez</u></b> , AR Andrade-Plata, C Hernández-Vásquez, MA González-Trujillo, ML Albor-Aguilera
13:20 – 13:40	<i>Ingeniería de interfaces en celdas solares de SnS depositadas por baño químico</i>	<b><u>Fernando Ayala Mató</u></b> , MTS Nair
13:40 – 14:00	<i>Comparación de los parámetros eléctricos de celdas solares de CdTe usando CdS y/o In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> como material ventana</i>	<b><u>María de Lourdes Albor-Aguilera</u></b> , César Hernandez-Vasquez, Miguel Ángel González-Trujillo
14:00 – 16:00	RECESO	
16:00 – 16:20	<i>Materiales basados en cobre aplicados como HTL en celdas solares de CdTe</i>	<b><u>Alejandro Emmanuel Medina-Bautista</u></b> , María de Lourdes Albor-Aguilera, and Maykel Courel
16:20 – 16:40	<i>Estudio morfológico y estructural de películas nanoestructuradas de ZnTe para aplicaciones fotovoltaicas en celdas solares de tipo CdTe</i>	<b><u>Christian Jimenez-Campero</u></b> , Miguel Angel González-Trujillo, César Hernández-Vásquez, Paulina Díaz Leal-Cortina, Jesús Adán Fierro López, María de Lourdes Albor-Aguilera
16:40 – 17:00	<i>Caracterización estructural y óptica de películas ultradelgadas de ZnS como alternativa prometedora al CdS en celdas solares de CdTe</i>	<b><u>Paulina Díaz Leal Cortina</u></b> , María de Lourdes Albor Aguilera, Massimo Bertino, Christian Jiménez Campero

**MARTES 23 DE JUNIO. SESIÓN PRESENCIAL DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA.**

**Preside la sesión: Dr. Francisco Estrada Chávez, Dr. Outmane Oubram**

CONFERENCIA PLENARIA		
9:30-10:30	<i>Dinámica de Entrelazamiento y Control en Osciladores Acoplados con Frecuencia Dependiente del Tiempo mediante Invariantes de Ermakov</i>	<b><u>Roberto Bernal-Jaquez</u></b>
CONFERENCIAS		
10:30-11:00	<i>Role of non-extensivity <math>q</math>-parameter in tectonic seismic thermodynamics</i>	Oscar Sotolongo-Costa, <b><u>Miguel Eduardo Mora-Ramos</u></b>
11:00-11:30	<i>Estados cuasilocalizados, la importancia de la función de onda</i>	<b><u>Luis Manuel Gaggero-Sager</u></b>
11:30-12:00	<i>Efecto de la nanocristalización en materiales vítreos sustentables luminiscentes dopados con iones de disprosio</i>	<b><u>José Escorcía García</u></b> , Carolina Jaanai Saucedo Flores
12:00-12:15	<i>Influencia del desorden estructural en las propiedades ópticas no lineales de pozos cuánticos <math>\delta</math>-dopados dobles en GaAs</i>	<b><u>Humberto Noverola-Gamas</u></b> , Eddy Rabanales-Marquez, Luis M. Gaggero-Sager, Outmane Oubram
12:15-12:30	<i>Control de la absorción óptica lineal y no lineal mediante campos eléctricos y magnéticos en anillos cuánticos toroidales core-shell de GaAs/AlGaAs</i>	Belén Eugenia Maldonado Villa, Karla Arely Rodríguez Magdaleno, Rebeca Victoria Herrero Hahn, Carlos Alberto Duque Echeverri, <b><u>Juan Carlos Martínez Orozco</u></b>
12:30-15:30	RECESO	
<b>Preside la Sesión de la Tarde : Dr. J.G. Rojas-Briseño, Juan Carlos Martínez-Orozco</b>		
15:30-16:30	<i>Baterías de iones, perovskitas y modelado</i>	<b><u>E. Carvajal</u></b> , J.E. Antonio, J.M. Cervantes, H. Muñoz, J.L. Rosas, M.A. Montufar
16:30-17:00	<i>MoS<sub>2</sub>/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Heterojunction Single-Atom Catalysts for Hydrogen Evolution and Oxygen Evolution Reactions: A Density Functional Theory Study</i>	<b><u>Ahmed Al-Shami</u></b> , Thomas Stegmann
17:00-17:30	<i>Nanoestructuras semiconductoras para generación de energía y almacenamiento y detección molecular: estudios a primeros principios</i>	<b><u>A. Trejo</u></b> , A. Miranda, F. Salazar, M. Cruz-Irisson

## MARTES 23 DE JUNIO. SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES.

Preside la sesión: Dr. Maykel Courel Piedrahita

CONFERENCIAS VIRTUALES		
<a href="https://meet.google.com/iqw-woxb-kqe">https://meet.google.com/iqw-woxb-kqe</a>		
CONFERENCIAS EN LINEA		
10:00– 10:20	<i>Electrical properties of PEDOT:PSS/CdTe junction</i>	<b>R.C. Ruiz Ortega</b> , M. L. Albor Aguilera, M. A. González Trujillo
10:20– 10:40	<i>Estudio teórico sobre celdas solares de SnSSe con la incorporación de superredes</i>	<b>E. Roblero-Castañón</b> , I. Montoya De Los Santos, Maykel Courel
10:40– 11:00	<i>Evaluación de la eficiencia de una celda solar de perovskita MAPb(I<sub>1-x</sub>Br<sub>x</sub>)<sub>3</sub> con pozos cuánticos bajo el límite radiativo mediante simulación numérica</i>	<b>Daniel A. Uribe-Colima</b> , Maykel Courel
11:00– 11:20	<i>Comparative Analysis of Organic and Inorganic HTLs for Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Solar Cells: A SCAPS-ID Study</i>	<b>Farhan Yousaf</b> , Maykel Courel Piedrahita, María de Lourdes Albor Aguilera
11:20– 11:40	<i>Estudio morfológico de películas delgadas de CdSe depositadas en área grande</i>	<b>Guillermo Leonardo Vidal-Martínez</b> , María de Lourdes Albor-Aguilera, César Hernandez-Vasquez, Miguel Angel González Trujillo
11:40– 12:00	<i>Ag<sub>3</sub>SbS<sub>3</sub> Thin Films Prepared by Electrodeposition for Photoelectrochemical Cell Applications: Structural, Morphological, and Optical Properties</i>	<b>R.G. Avilez García</b> , T.G Gonzalez, R.G.Sotelo Marquina, X. Mathew, N.R Mathew

## MARTES 23 DE JUNIO. SESIÓN DE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS.

Preside la sesión Juan Manuel Ramírez de Arellano.

Sesión virtual en el siguiente enlace de Zoom:

<https://us02web.zoom.us/j/86461731039?pwd=V5VSPc0tmT2tAqYTLShKAziZR89bIy.1>

O con la siguiente ID de Zoom: 864 6173 1039 (contraseña: 990 913).

10:00–11:00	<i>Charla plenaria: Interacciones débiles y fuertes en clatratos y superficies metálicas</i>	<b><u>Ramón Hernández Lamonedá.</u></b>
11:00–11:30	<i>Fotodegradación de contaminantes farmacéuticos (aspirina y metformina) mediante el cúmulo cúbico <math>MoFe_3S_4</math> en agua</i>	<b><u>JG Ramírez-Arteaga,</u></b> K. G. Madrigal-Carrillo, Alan Miralrio, Miguel Castro
11:30–12:00	<i>Sitios de átomos individuales sobre óxido de siliceno: hacia una comprensión de su estabilidad térmica</i>	<b><u>Andrés Álvarez-García,</u></b> Roxana Miztayé del Castillo Vázquez, José Eduardo González, Raúl Arturo Espejel-Morales, Alipio Gustavo Calles
12:00–12:30	<i>Cucurbiturilos como acarreadores de fármacos en quimioterapia: un estudio mediante inteligencia artificial y teoría del funcional de la densidad</i>	Marian Valentina Vilchis Alcantara, Fernando Buendia Zamudio, Angélica Maria Fierro Huerta, Margarita Elly Aliaga Miranda, <b><u>Alan Miralrio.</u></b>
12:30–16:00	RECESO	
16:00–16:30	<i>Estudio ab initio de las propiedades ópticas de la superficie de Ti [0001] con un recubrimiento de carbono y una capa de grafeno altamente decorado con Ti</i>	A. Zárate, O. Salas, <b><u>Mónica Canales,</u></b> L. F. Magaña.
16:30–17:00	<i>Engineering MAPbI3 Perovskites by Sn/Ge and Cl/Br Co-Doping: Insights from First-Principles Calculations</i>	<b><u>K. Ouassoul,</u></b> T. E. Soto, B. Aguilar, O. Navarro
17:00–17:30	<i>Modelado DFT de híbridos Ho(III)–nanopuntos de carbono: transferencia de carga y detección fluorescente de oxalato</i>	<b><u>Jonathan Siu Loong Robles Hernández,</u></b> Ivan Humberto Hernández Sánchez, Alfredo Jiménez-Mondragón, Ana María Soto-Estrada, Alan Miralrio
17:30–18:00	<i>Efectos de la estequiometría en superficies <math>W_xCy</math> al adsorber NO utilizando cálculos de primeros principios</i>	Luis Fernando Magaña Solís, <b><u>Mariana Esther Torres Revuelta</u></b>
18:00–18:30	<i>Respuesta SERS en cúmulos de Cu, Ag y Au con Py: el potencial de los sistemas bimetalicos Ag-Cu</i>	<b><u>Halis Y. Seuret,</u></b> Cercis Morera Boado

## MARTES 23 DE JUNIO. SESIÓN DE FÍSICA MATEMÁTICA.

Preside la sesión: **Dr. José Antonio Otero Hernández** y **Dr. Yoanh Espinosa-Almeyda**.

Sesión presencial y en línea a través de la liga: <https://us06web.zoom.us/j/2872643638>

<b>Preside la sesión de la mañana Yoanh Espinosa-Almeyda</b>		
9:00-9:30	<i>Fractional Driven Damped Oscillator: Solution and Forced Response Analysis.</i>	<b><u>Fernando Olivar Romero</u></b>
9:30-10:00	<i>Control de inundaciones urbanas mediante válvulas Tesla: Un modelo de parámetros concentrados.</i>	<b><u>Mario Iván Estrada Delgado</u></b>
10:00-10:30	<i>Towards Disease Eradication: Long-Term Control with Constant Vaccination Rates in the Normalized SIR Model.</i>	<b><u>Jorge Antonio Becerril Gómez</u></b>
10:30-11:00	<i>Modelación de la velocidad y resiliencia del tráfico en intersecciones bajo condiciones de accidente mediante autómatas celulares.</i>	<b><u>R. Marzoug</u></b> , N. Lakouari, G.A. Mejía Pérez, B. Castillo Téllez, M. Castillo Téllez.
11:00-11:30	<i>Dinámica de fusión en materiales de cambio de fase confinados mediante propiedades térmicas efectivas.</i>	<b><u>V. Domínguez-Rocha</u></b> , F. Ramírez-Ramírez, José A. Otero, R. Pérez-Álvarez.
11:30-12:00	<i>Modelación numérica y evaluación térmica de un Sistema de almacenamiento de energía con materiales de cambio de fase.</i>	<b><u>F. Ramírez-Ramírez</u></b> , R. Pérez-Álvarez, José A. Otero, V. Domínguez-Rocha, Valter Silva Nava.
12:00-12:30	<i>Analyzing Peptide Torsional Dynamics: An Angular-Displacement PCA Pipeline for Short-Horizon Prediction from Molecular Dynamics.</i>	<b><u>Amaury C. Alvarez</u></b> , Luis Albrizzi, Gabriel Gayoso, José Colbes, Santiago Di Lella, Christian E. Schaerer.
12:30-13:00	<i>Modos flexionales en vigas de sección transversal variable.</i>	<b><u>Alfredo Díaz de Anda</u></b>
13:00-14:30	RECESO	
<b>Preside la sesión de la tarde José Antonio Otero Hernández</b>		
14:30-15:00	<i>PINN-Assisted Asymptotic Homogenization of one-dimensional composites with interface effects.</i>	<b><u>Reinaldo Rodríguez-Ramos</u></b> , Boris Mederos, Yoanh Espinosa-Almeyda, Héctor Camacho Montes, Oscar L. Cruz-González, Amaury C. Alvarez, José A. Otero.
15:00-15:30	<i>Un enfoque algebraico para colisiones colineales diátomo-diátomo en la aproximación semiclásica.</i>	<b><u>Rubén Darío Santiago Acosta</u></b> , Renato Lemus Casillas.
15:30-16:00	<i>Estimación de las propiedades efectivas de compuestos termoelásticos mediante una homogeneización semianalítica reiterada.</i>	<b><u>José Antonio Otero</u></b> , Reinaldo Rodríguez-Ramos, Yoanh Espinosa-Almeyda.
16:00-16:30	<i>Influencia de la textura cristalográfica y la porosidad en las propiedades elásticas de materiales policristalinos de <math>\alpha</math>-alúmina.</i>	<b><u>H. Camacho Montes</u></b> , J.D. Gamboa Garay, Y. Espinosa Almeyda, J.O. Herrera Robles, J.A.

		Otero Hernández, R. Rodríguez Ramos, B.J. Mederos Madrazo, F.J. Sabina, R.K. Bordia.
16:30-17:00	<i>Propiedades efectivas de compósitos micropolares elásticos multifásicos reforzados con fibras cilíndricas concéntricas.</i>	<b><u>Yoanh Espinosa-Almeyda</u></b> , R. Rodríguez-Ramos, J. A. Otero, H. Camacho-Montes, Boris Mederos.
17:00-17:30	<i>Aproximación Neuronal Informada por la Física y Recuperación de Parámetros para Modelos SIR de Transmisión de Enfermedades.</i>	<b><u>Boris Mederos</u></b> , Yoanh Almeyda-Espinosa, Jorge Terrazas, Gaizka Ferrara-Rivera, Héctor Camacho-Montes, Amaury Álvarez-Cruz, Reinaldo Rodríguez-Ramos, Oscar L. Cruz-González.

**MARTES 23 DE JUNIO. SESIÓN DE CARTELES. 17:30-19:15.**

<b>Num.</b>	<b>Título</b>	<b>Autores</b>
1	<i>Acoplamiento fuerte fotón–magnetoexcitón en metamateriales cuánticos: un enfoque de homogenización no local</i>	P. L. Valdés-Negrin, N. M. Makarov, F. Pérez-Rodríguez
2	<i>Estimación de la producción en un invernadero con internet de las cosas y aprendizaje automático</i>	Pablo Humberto Hernández Peralta, Outmane Oubram, Pedro Moreno
3	<i>Influencia del desorden estructural en las propiedades ópticas no lineales de pozos cuánticos <math>\delta</math>-dopados dobles en GaAs</i>	Eddy Rabanales-Marquez, Luis M. Gaggero-Sager, Humberto Noverola-Gamas, Outmane Oubram
4	<i>Control Geométrico de las Oscilaciones Aharonov-Bohm en Anillos Cuánticos de Fosforeno por Gating Electroestático</i>	Nancy Liliana Morales Villamizar, Jhon Freddy Torres Gómez, Rogelio Rodríguez González, Jaime Raúl Suarez López
5	<i>Efecto de índice casi cero en estructura fotónica de silicio con asimetría de reflexión</i>	Marco A. Tun-Carrillo, Miguel E. Mora-Ramos, Hernán A. Gómez-Urrea, Ignacio Pérez-Quintana
6	<i>Propiedades Termoeléctricas en Superredes de Potenciales no Convencionales Basadas en MoS<sub>2</sub></i>	A. J. de la Rosa-Jasso, I. Rodríguez-Vargas, J. A. Briones-Torres
7	<i>Estudio de la dimensión fractal y análisis espectral de potencias en geometrías complejas 2D</i>	G. A. Navarro-López, R. Rodríguez-González, R. D. Valdez-Cepeda, y Rodríguez-Vargas
8	<i>Transmitancia tipo “boxcar shape” en estructuras no convencionales basadas en siliceno</i>	Marla N. Hernández-Delgado, R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas
9	<i>Efecto de la aperiodicidad en dispositivos versátiles basados en WS</i>	L.A. Díaz-Valerio, S. Molina-Valdovinos, R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas
10	<i>Efecto del desorden estructural sobre propiedades ópticas no lineales de pozos cuánticos <math>\delta</math>-dopados dobles en GaAs</i>	Eddy Rabanales-Marquez, Luis M. Gaggero-Sager, Humberto Noverola-Gamas, Outmane Oubram
11	<i>Estados de borde topológicos inducidos por la manipulación de paredes de dominio en puntos cuánticos de bicapa de Grafeno</i>	Jhon Freddy Torres Gómez, Rolando Pérez Álvarez, Carlos Iván Cabrera Perdomo
12	<i>Polarization and Valley-Spin Transport in Ferromagnetic-Silicene/Germanene/Ferromagnetic-Silicene Lateral Heterostructure</i>	B. D. Gutierrez-Reyna, M. Miniya, O. Oubram

13	<i>Defectos estructurales y fotoluminiscencia de sistemas de CaTiO<sub>3</sub> dopados con Ce/Dy</i>	Andrea Danielle Cancino Moreno, Stephany Natasha Arellano Ahumada, Arturo López Marure, Daniel Ramírez Rosales
14	<i>Polarización de espín-valle y magnetorresistencia de efecto túnel inducidas por tiras antiferromagnéticas sobre siliceno</i>	A. Sánchez-Ortiz, I. Rodríguez-Vargas, S. Molina-Valdovinos, J.G. Rojas-Briseño
15	<i>Fuzzy Logic-Driven Cellular Automaton for Pedestrian-Vehicle Interaction at Crosswalks</i>	Jeferson Daniel Rosero Benavides, José Roberto Pérez Cruz, Noureddine Lakouari
16	<i>Cristales fotónicos temporales hiperbólicos</i>	Antonio Mayorquin Galicia, Shunashi Guadalupe Castillo López
17	<i>Efecto del campo de láser intenso y del voltaje de contacto en las propiedades ópticas del triple <math>\delta</math>-MIGFET en alta frecuencia (THz)</i>	Carlos Rosales de Jesús, Eddy Rabanales-Marquez, Yair Alejandro Gutierrez-Alvarez, Humberto Noverola-Gamas y Outmane Oubram
18	<i>Termalización en una cadena tipo SSH del modelo de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou</i>	Jose Angel Ake Jimenez, Gerardo García Naumis
19	<i>Modelo efectivo a dos bandas para el confinamiento topológico en puntos cuánticos de bicapa de grafeno</i>	Jhon Freddy Torres Gómez, Rolando Pérez Álvarez, Carlos Iván Cabrera Perdomo
20	<i>Efectos de la alta presión sobre la estructura y propiedades electrónicas del cúmulo Au<sub>20</sub>: un estudio mediante DFT</i>	Halis Y. Seuret, Cercis Morera Boado, Rolando Pérez Álvarez
21	<i>Propiedades Termoeléctricas en Bicapa de Grafeno con Superredes de Potencial No Convencional</i>	L. B. Martinez-Ytuza, J. A. Briones-Torres, I. Rodríguez-Vargas
22	<i>Hyperbolic Plasmon dispersion and Optical Conductivity of Holey Graphene: signatures of flat-bands</i>	Abdiel de Jesús Espinosa Champo, Gerardo García Naumis
23	<i>Aplicación de aprendizaje automático para la clasificación del desempeño de baterías de iones de litio a partir de la eficiencia coulombica y la conductividad del electrolito</i>	Sergio Rubén Ocampo Pérez, Outmane Oubram, Noureddine Lakouari
24	<i>Predicción del Transporte Electrónico en Superredes de Grafeno mediante Técnicas de Aprendizaje Automático</i>	Gerardo Valdez Martínez, Outmane Oubram, Mohammed Miniya
25	<i>Propiedades vibracionales de nanoalambres de InAs: un estudio semiempírico usando DFTB</i>	A. Barranco, J. Galván, J. L. Cuevas, M. Ojeda, A. Trejo, F. Salazar, A. Miranda, M.Cruz-Irisson
26	<i>Reconocimiento automático de la Lengua de Señas Mexicana (LSM) en contextos clínicos mediante visión computacional con arquitecturas Vision Transformer</i>	Juan Pablo Robles Torres, Dr. Outmane Oubram, Dr. Mario Limón Mendoza

27	<i>Enfoque de enlace fuerte para la formación de minibandas en superredes de pozos cuánticos de perovskita</i>	I. J. Valdez-Saucedo, C. I. Cabrera-Perdomo, R. A. Reyes-Villagrana
28	<i>Impacto de los esquemas de corrección DFT-1/2 y shDFT-1/2 en la configuración electrónica y propiedades ópticas de las fases monoclinicas de Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub></i>	Gerardo Jafet González-Loera, K. A. Rodríguez-Magdaleno, F. M. Nava-Maldonado, M. E. Mora-Ramos, J. C. Martínez-Orozco
29	<i>Modulación de las propiedades optoelectrónicas en bicapas de GaAs con apilamiento AA1 mediante dopaje con Ge</i>	Julio César Reyes de León, Gerardo Jafet González Loera, Karla Arely Rodríguez Magdaleno, Faustino Aguilera Granja, Flavio Manuel Nava Maldonado, Juan Carlos Martínez Orozco
30	<i>Estudio de la bianisotropía en metamateriales: representación de Haydock del operador maxwelliano</i>	Eduardo Enrique Viveros Armas, Wolf Luis Mochán Backal
31	<i>Sobre procedimientos algebraicos para la simplificación a modos particulares de las ecuaciones de movimiento para ondas en materiales de interés</i>	G. Laffit N. Estrada, Rolando Pérez-Álvarez
32	<i>Topological features in a single-layer graphene obtained through a numerical simulation beyond the Dirac approximation</i>	José Carlos Rebón, Fabrizio García-Marín, Francisco Delgado
33	<i>Estudio DFT de nanoalambres de [111]-SiC con Na superficial para material anódico</i>	Mario Gonzalez Perez, Alejandro Trejo, Fernando Salazar, Miguel Cruz-Irisson
34	<i>Adsorción y detección de monóxido de carbono en siligeno pristino: un estudio de primeros principios</i>	Alejandro Barranco-Sainz, Ranferi C. Betancourt, Álvaro Miranda, Miguel Cruz-Irisson
35	<i>Difusión de Litio en nanoalambres de Carburo de Silicio pasivados con Hidrogeno</i>	Dafne D. Barranco, Fernando Salazar Posadas, Miguel Cruz-Irisson
36	<i>Exploring the Photovoltaic Performance of (CdTe)<sub>1-x</sub>Al<sub>x</sub> Thin Films in Heterostructures with a ZnIn<sub>2</sub>S<sub>4</sub> Window Layer</i>	J.A. Melchor-Robles, Abhishek Chandel, KE-Nieto Zepeda, Tatsuya Sasaki, Masakazu Kobayashi, Miguel Melendez-Lira
37	<i>Janus NbSCl: A Strain-Tunable 2D Semiconductor for Next-Generation Optoelectronics</i>	Abhishek Chandel, Jair Antonio Melchor Robles, Osvaldo de Melo, Miguel Ángel Melendez Lira

38	<i>Caracterización Termográfica de Hotspots en Módulos Fotovoltaicos mediante Análisis Geométrico</i>	J. I. Verdugo-Hernández, Y. Rodríguez-Lazcano, M. Miniya, A. R. Figueroa-Flores
39	<i>Análisis del efecto ambiental del sistema interconectado nacional usando un modelo de despacho económico incorporando señales ambientales</i>	Jesus Adrian Diaz de la Vega Luna, Luis Cisneros Villalobos
40	<i>Síntesis y caracterización de películas delgadas nanoestructuradas de YSZ con potencial aplicación en celdas de combustible</i>	Mario Fidel García Sánchez, Kevin Enrique Salazar Martínez, Miguel Antonio Domínguez Crespo
41	<i>Interacción entre el monómero de celulosa e hidróxido de sodio: un estudio DFT</i>	Omar Rodríguez Rivero, G. Ramírez Damaso, T. Ramírez Rodríguez, F.L. Castillo Alvarado, F. Caballero.
42	<i>Estudios ab-initio de la antiperovskita (LiFe)<sub>3</sub>SO para el uso de almacenamiento de energía</i>	Eduardo Azael Hoy Canul, Zakaryaa Zarhri
43	<i>Vanadium Oxide Thin Films as Catalysts for Green Hydrogen Production</i>	Pastor A. Rodríguez Echeverría, Mario F. García Sánchez
44	<i>Nanoestructuras unidimensionales de óxido de zinc sintetizadas mediante la técnica Vapor-Líquido-Sólido para la degradación de contaminantes emergentes</i>	José Francisco Malagón García, Mario Fidel García Sánchez, Ateet Dutt
45	<i>Desarrollo del 6 to principio de la química verde durante la síntesis de un nanomaterial con presencia de actividad antimicrobiana</i>	Vianey Urdapilleta-Inchaurregui, Rafael Colin-López, Janies Merari García-Velasco, Estrella Suarez María-Verónica
46	<i>Propiedades electroquímicas de películas delgadas de óxido de cerio nanoestructurado</i>	Gabriela M. Reyes Ch., Mario F. García Sánchez, Inti Z. Dubé
47	<i>Análisis modal y armónico de placas piezoeléctricas cilíndricas basados en simetría: comparación de placa piezoeléctrica completa vs 1/8.</i>	<b><u>Axavácatl A. N. Montiel</u></b> , J. Enrique Chong-Quero, José A. Otero.
48	<i>Development of Bio-Based Core-Shell Phase Change Microcapsules for Thermal Energy Storage.</i>	<b><u>Dannya Martínez Cervantes</u></b> , Dulce Viridiana Melo Máximo, J. Enrique Chong-Quero, José A. Otero.
49	<i>A Hybrid Machine Learning Framework for Solving the Inverse Problem in Laminated Composites.</i>	<b><u>Rodrigo Correa López</u></b> , José A. Otero, Ángel Alejandro García Chung.

## RESÚMENES DE PRESENTACIONES – SESIÓN PRESENCIAL: FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

### Replicación de la física del grafeno bicapa rotado por ángulos mágicos mediante AsGa sometido a una superred de compuertas

Pierre Pantaleón<sup>1</sup>, Zhen Zhan<sup>1</sup>, Gerardo G. Naumis<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*IMDEA Nanoscience, Faraday 9, 28049 Madrid, Spain*

<sup>2</sup>*Departamento de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM),  
Apartado Postal 20-364, 01000 México Distrito Federal, Mexico*

Correo electrónico:  
naumis@fisica.unam.mx

La física del grafeno bicapa rotado por ángulos mágicos ha sido muy estudiada por la aparición de bandas planas topológicas que dan lugar a numerosas fases cuánticas muy interesantes, como lo son las fases superconductoras o el efecto Hall fraccionario anómalo. Aquí proponemos replicar esta física mediante gases de electrones bidimensionales (2DEG) en AsGa sometidos a una compuerta con un patrón periódico [1]. Al incorporar el potencial de superred (SL) inducido por el patrón en la ecuación de Schrödinger, desarrollamos una metodología para obtener soluciones analíticas exactas. Estas soluciones nos permiten construir un diagrama de fases completo que ilustra la aparición de bandas estrechas y pseudo-niveles de Landau impulsados por el potencial de la SL, características de la física de los ángulos mágicos.

Para complementar el enfoque analítico, empleamos un formalismo estándar de ondas planas para seguir la evolución de la estructura de bandas a medida que aumenta la intensidad de la SL. Al romper la simetría de inversión del potencial de la SL, encontramos curvaturas de Berry no triviales mostrando que aparecen bandas planas topológicas. Además, introducimos un apantallamiento de Hartree autoconsistente para dar cuenta de la interacción entre el potencial de la SL y las interacciones electrón-electrón.

Nuestros resultados no solo revelan la aparición de una geometría cuántica no trivial y una competencia entre la intensidad de la SL y las interacciones electrón-electrón, sino que también destacan el valor de las soluciones analíticas exactas para comprender y diseñar fases electrónicas en sistemas 2DEG con patrones periódicos.

# PATRON DE LÍNEAS NODALES ANÓMALO EN EL COMPORTAMIENTO VIBRACIONAL DE UNA PLACA METÁLICA RECTANGULAR.

Guillermo Monsivais Galindo<sup>1</sup>, Luis Gutiérrez<sup>2</sup>, Alejandro Morales<sup>2</sup>, F. Ramírez-Ramírez<sup>3</sup>, José A. Otero<sup>4</sup>.

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México. Mexico.*

<sup>2</sup>*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, Morelos. Mexico.*

<sup>3</sup>*Centro de Estudios Técnicos, Colegio Superior Agropecuario del Estado de Guerrero, Huitzuco, México.*

<sup>4</sup>*Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Carr. al Lago de Guadalupe Km. 3.5, Atizapán de Zaragoza, 52926~Estado de México. Mexico.*

## RESUMEN

En un estudio reciente mostramos, tanto teórica como experimentalmente, que el análisis de las vibraciones de una placa rectangular elástica, homogénea e isotrópica se puede simplificar considerando sólo un octavo de la placa, utilizando sus propiedades de simetría. Nuestros resultados los comparamos con los cálculos correspondientes a la placa completa y obtuvimos una concordancia excelente. La utilidad de esta metodología radica en que usualmente al estudiar las vibraciones de una placa lo primero que se hace es determinar las frecuencias vibración y posteriormente determinar a qué tipo de oscilación corresponden (flexional, torsional, axial). Sin embargo, al conocer únicamente las frecuencias no se sabe *a priori* de qué tipo vibración se trata. En cambio, con el análisis de las simetrías se puede saber por adelantado a qué tipo de vibración corresponde. Un resultado importante para esta presentación fue el verificar que, para cada frecuencia resonante de la placa completa, existía un patrón de líneas nodales bien definido. Pero posteriormente descubrimos que no todo patrón bien definido de líneas nodales correspondía a una frecuencia resonante. A esto es a lo que hemos llamado patrón anómalo.

# Ingeniería de paredes de dominio topológicas mediante campos magnéticos no uniformes

Carlos Ramírez Ramos, Ricardo Yael Díaz Bonifaz

*Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México*

Correo electrónico: carlos@ciencias.unam.mx

El efecto Hall cuántico entero constituye un pilar fundamental en el estudio de las fases topológicas de la materia, caracterizado por una conductancia transversal cuantizada y la aparición de estados de borde robustos [1,2]. En esta plática, se revisa brevemente su descubrimiento experimental y se presenta un tratamiento teórico mediante el formalismo de Landauer-Büttiker, el cual proporciona un marco para describir el transporte en sistemas mesoscópicos [3]. Un aspecto clave es la relación entre el número de canales de borde y el número de Chern, un invariante topológico que clasifica los estados Hall cuánticos.

Se explora cómo variaciones espaciales del campo magnético inducen regiones con distinto carácter topológico, dando lugar a paredes de dominio topológicas que alojan estados localizados cuyo número viene determinado por la diferencia de números de Chern entre regiones adyacentes. Para modelar estos perfiles magnéticos heterogéneos, se emplea el algoritmo *Dots and Boxes* [4], que permite construir configuraciones de campo controladas.

Dentro de este marco, se analiza la conductancia en barras Hall multiterminal en presencia de paredes de dominio y se estudia la aparición de estados ligados en el continuo. Mostramos que estos estados pueden permanecer espacialmente aislados de los modos de borde extendidos debido a la protección topológica, particularmente en geometrías con huecos internos y regiones anidadas con distintos números de Chern [5,6].

Estos resultados proporcionan una vía para el diseño y control de estados localizados en sistemas topológicos, con posibles implicaciones en la ingeniería del transporte cuántico en dispositivos mesoscópicos.

## Agradecimientos

Investigación realizada gracias al Programa UNAM-PAPIIT IN116025. Los cálculos fueron realizados en Miztli bajo el Proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-329. Ricardo Y. Díaz-Bonifaz agradece a SECIHTI por la beca de Posgrado otorgada.

[1] K. Klitzing, G. Dorda y M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* 45, 494 (1980).

[2] D.J. Thouless, M. Kohmoto, M.P. Nightingale y M. den Nijs, *Phys. Rev. Lett.* 49, 405 (1982).

[3] C. Ramírez y L.A. Medina-Amayo, *Ann. Phys.* 378, 303 (2017).

[4] R.Y. Díaz-Bonifaz y C. Ramírez, *J. Phys.: Condens. Matter* 37, 105301 (2025).

[5] R.Y. Díaz-Bonifaz y C. Ramírez, *Physica E* 164, 116056 (2024).

R.Y. Díaz-Bonifaz y C. Ramírez, *Phys. Rev. B* 112, 195421 (2025).

## **Polarización de valles y espín en una barrera magnética basada en una monocapa de 1T'-MoS<sub>2</sub>**

J.G. Rojas-Briseño<sup>1</sup>, A. Astraín-Ortega<sup>1</sup>, Y.Y. Huamani-Tapia<sup>1</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.*

Correo electrónico: jgrojas@uaz.edu.mx

El disulfuro de Molibdeno en monocapa (MoS<sub>2</sub>) es el segundo material bidimensional más estudiado después del grafeno. En forma en bulto, es un semiconductor de band gap indirecto, pero en monocapa pasa a ser un material de gap directo. Al igual que el grafeno, la monocapa se obtiene mediante exfoliación mecánica. Tanto en bulto como en monocapa, el MoS<sub>2</sub> posee varias fases siendo la 2H y la 1T' las más estudiadas. Además, es uno de los materiales donde se han reportado trabajos experimentales de polarización de valles. En la fase 2H ya existen numerosos reportes sobre propiedades de transporte, incluyendo conductancia y polarización de valles y espín. En el presente trabajo se reporta el primer estudio de polarización de valles y espín en la fase 1T' en una barrera magnética. La interacción de tiras ferromagnéticas mediante el efecto de proximidad es relevante para poder obtener regiones perfectas de polarización de valles y espín.

### **Agradecimientos**

JGRB - Secretaria de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por la estancia posdoctoral.

# Antirresonancias de las escaleras de Wannier-Stark en cadenas de Su-Schrieffer-Heeger

Yonatan Betancur Ocampo<sup>1</sup>, Guillermo Monsivais<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, 04510, Ciudad de México, México*  
Correo electrónico: ybetancur@fisica.unam.mx

Demostramos que las escaleras de Wannier-Stark (WSL) en cadenas de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) se manifiestan como señales de antirresonancia distintivas en la transmisión electrónica. Al someter la cadena a un gradiente electrostático lineal, consideramos la banda de energía completa en la aproximación de enlace fuerte, incluyendo todos los términos de orden superior en el hamiltoniano de Bloch. El transporte de electrones se modela a partir del hamiltoniano SSH completo utilizando el método de la matriz global junto con condiciones de acoplamiento no triviales. El análisis de la función de onda revela que las antirresonancias de las WSL se caracterizan por una localización exponencial en el extremo de incidencia de la onda. Estos hallazgos proporcionan un marco robusto para identificar WSL en diversas plataformas físicas, desde la conductividad en el *trans*-poliacetileno hasta análogos artificiales en cristales fonónicos y ondas superficiales de agua.

## Agradecimientos

Y.B-O. agradece el financiamiento de la investigación desde el proyecto UNAM-PAPIIT IA-102125:  
“Modelos efectivos de aislantes topológicos en sistemas de baja dimensionalidad”

## Optimization of Thermoelectric Response in Fractal-Like Graphene Superlattices

Mohammed Miniya<sup>1</sup>, David Quesada Saliba<sup>2</sup>, Outmane Oubram<sup>3</sup>, Isaac Rodríguez-Varga<sup>4</sup>, Yamilet Rodríguez-Lazcano<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Unidad Académica de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma de Nayarit, 63155 Tepic, Nayarit

<sup>2</sup>Computational Clinical Systems Biology Group, INIM, Nova Southeastern University, Ft. Lauderdale/Davie, FL, USA

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

<sup>4</sup>Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, Circuito Marie Curie S/N, Parque de Ciencia y Tecnología QUANTUM Ciudad del Conocimiento, 98160 Zacatecas, Zacatecas, México

Correo electrónico: [yamilet.lazcano@uan.edu.mx](mailto:yamilet.lazcano@uan.edu.mx), [m.miniya@uan.edu.mx](mailto:m.miniya@uan.edu.mx)

We investigate thermoelectric properties performances of a four-generation self-similar structure based monolayer graphene. Using the transfer matrix and Cutler–Mott formalisms, we calculate the Seebeck coefficient, power factor, and figure of merit (ZT). We analyze the optimization of efficiency and power output through the behavior of transmission minibands. Our results reveal an inverse relationship between miniband width and efficiency: the thin minibands lead to higher efficiency but lower power output, similar to the boxcar function reported for Gaussian-type superlattices.

## **Transporte balístico y efecto termoeléctrico en superredes tipo Gaussiana aplicadas a fosforeno.**

E.J. Guzmán<sup>1</sup>, O. Navarro<sup>1</sup>, I. Rodríguez-Vargas<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. Ex Hacienda San José de la Huerta, C.P.*

*58190, Morelia, Michoacán, México*

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

Correo electrónico: [jovani.guzman13@gmail.com](mailto:jovani.guzman13@gmail.com)

En años recientes, la investigación en los materiales bidimensionales (2D) se ha incrementado debido a sus extraordinarias propiedades físicas y electrónicas, las cuales pueden aprovecharse para aplicaciones tecnológicas con mejores funcionalidades. Los materiales 2D similares grafeno, como silíceno y fosforeno se conforman de átomos distribuidos en una red cristalina hexagonal plana o corrugada. Estos materiales son semiconductores con propiedades electrónicas sobresalientes: tales como una estructura de bandas anisotrópica, un gap de energía no cero, fuerte acoplamiento espín-orbita, alta movilidad y conductividad de los portadores de carga, entre otras. Lo que los hace prometedores para futuras aplicaciones en nanoelectrónica. En este trabajo, se investiga el transporte balístico de los portadores de carga (electrones y huecos) en superredes tipo Gaussiana aplicadas sobre un material 2D. En este sistema, partiendo del hamiltoniano efectivo del modelo de tight-binding, se calculan numéricamente la probabilidad de transmisión y la conductancia usando la técnica de la matriz de transferencia y el formalismo de Landauer-Büttiker. Finalmente se estudia el efecto termoeléctrico (conversión de calor en electricidad directamente) mediante el cálculo del coeficiente de Seebeck, el factor de potencia y la figura de Merito (eficiencia de conversión) en un sistema a circuito abierto y bajo un gradiente de temperatura.

### Agradecimientos

E.J. Guzmán agradece a SECIHTI por el apoyo y financiamiento de la estancia de investigación posdoctoral.

Este trabajo fue parcialmente financiado por el proyecto PAPIIT-IN109626 de la UNAM.

## Homogenización de metamateriales magnetizables

W. Luis Mochán<sup>1</sup>, Merlyn J. Juárez-Gutiérrez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*ICF-UNAM, México*

<sup>2</sup>*Centre Énergie Matériaux et Télécommunications, INRS, Canada*

mochan@fis.unam.mx

Hemos desarrollado un método [1] análogo a la recursión de Haydock [2] para calcular la permitividad macroscópica de metamateriales multicomponentes anisotrópicos periódicos. En este trabajo extendemos dicho método para incorporar una posible permeabilidad magnética posiblemente anisotrópica, con pérdidas y/o ganancia y dependiente de la posición. Por un lado, esto permite abordar problemas electromagnéticos a frecuencias bajas, para las cuales la permeabilidad de las componentes no es despreciable. Por otro lado, esto permite construir películas delgadas que simulen condiciones de frontera absorbentes, lo cual permite simular mediante sistemas periódicos con celdas unitarias modestas sistemas no periódicos como pueden ser metasuperficies, que no son periódicas a lo largo de su normal, o partículas finitas individuales que no son periódicas en dirección alguna. Implementamos esta extensión en el paquete *Photonic* [3] y mostraremos algunas aplicaciones sencillas.

### Agradecimientos

Agradecemos el apoyo de DGAPA mediante el proyecto PAPIIT IN117925.

[1] Mochán, W. L., López-Reyna, A., & Ortiz, G. P. *Efficient Homogenization of Multicomponent Metamaterials: Chiral Effects*, *Physica Status Solidi (b)*, **262**, 2400526. (2025). <http://dx.doi.org/10.1002/pssb.202400526>

[2] Haydock, R. (1980). *The Recursive Solution of the Schrodinger Equation*. En H. Ehrenreich, F. Seitz, & D. Turnbull (Eds.), *Solid State Physics* **35**, 215 (1980). [https://doi.org/10.1016/S0081-1947\(08\)60505-6](https://doi.org/10.1016/S0081-1947(08)60505-6)

[3] W. Luis Mochán et al, *Photonic*, (2016) (Perl package for calculations on metamaterials and photonic structures), Comprehensive Perl Archive Network (CPAN) <https://metacpan.org/pod/Photonic>

# Efecto del dopaje con átomos de Ce y Ba sobre las propiedades estructurales y magnéticas de la doble perovskita $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$

T. E. Soto<sup>1</sup>, D. L. García Ruíz<sup>1</sup>, Bertha-Oliva Aguilar<sup>1</sup>, Joaquín de la Torre, O. Navarro Chávez<sup>4</sup>

<sup>1</sup> *Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales,  
Universidad Nacional Autónoma de México,  
Antigua carretera a Pátzcuaro No. 8701, Morelia, Michoacán, México*

Correo electrónico: [tania@materiales.unam.mx](mailto:tania@materiales.unam.mx)

Los óxidos medio metálicos con estructura de doble perovskita constituyen una clase de materiales con gran potencial para aplicaciones en espintrónica debido a su elevada polarización de espín y a sus propiedades magnetotransportadoras. Entre ellos, el sistema  $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$  (SFMO) ha despertado un interés considerable por presentar una alta temperatura de Curie (TC), una importante magnetorresistencia a bajo campo y una estructura electrónica favorable para el transporte dependiente del espín. Con el propósito de optimizar sus propiedades estructurales, magnéticas y de transporte, se ha explorado la sustitución parcial del sitio A de la perovskita mediante elementos con diferente valencia y radio iónico. En este contexto, el dopaje simultáneo con cerio (Ce) y bario (Ba) constituye una estrategia atractiva, ya que permite modificar la concentración de portadores de carga, el grado de orden Fe/Mo y las distorsiones de la red cristalina, factores que influyen directamente en las interacciones magnéticas y electrónicas del material. La presente investigación aborda la síntesis y caracterización estructural, morfológica y magnética del sistema  $\text{Sr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{Fe}_{1+x/2}\text{Mo}_{1-x/2}\text{O}_6$  y  $\text{Sr}_{2-x}\text{Ba}_x\text{FeMoO}_6$ , evaluando el efecto de la incorporación de Ce y Ba sobre las propiedades físicas del compuesto. El estudio busca establecer la correlación entre las modificaciones inducidas por el dopaje y el desempeño del material, con el fin de contribuir al desarrollo de compuestos con características mejoradas para aplicaciones en dispositivos espintrónicos.

## Agradecimientos

T. E. Soto agradece al proyecto IA-102026 PAPIIT-UNAM

# Materiales biogénicos activados por plasma a presión atmosférica para el tratamiento de aguas residuales

Claudia Karina Zagal Padilla<sup>1\*</sup>, Sergio Alberto Gamboa Sánchez<sup>2</sup>, Horacio Martínez Valencia<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Av. Universidad #1000, Col. Chamilpa, Cuernavaca CP 62210, Morelos, México

<sup>2</sup> Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México, Privada Xochicalco S/N, Centro, Temixco, Morelos, México CP 62580, México

Correo electrónico: [ckzgal@icf.unam.mx](mailto:ckzgal@icf.unam.mx)\*

El presente trabajo explora una estrategia innovadora para el tratamiento de aguas residuales industriales mediante el desarrollo de materiales biogénicos de ZnO sintetizados por química verde, utilizando extractos vegetales ricos en flavonoides, alcaloides y limonoides como agentes reductores y estabilizantes. La síntesis permitió obtener estructuras bidimensionales con morfología nanométrica y elevada área superficial, favoreciendo procesos interfaciales y reacciones *redox* de alta selectividad [1]. La superficie de los materiales fue modificada mediante plasma a presión atmosférica durante 10 y 15 min, induciendo cambios optoelectrónicos asociados con defectos cristalinos. Los análisis por XRD confirmaron la conservación de la fase hexagonal wurtzita, mientras que EPR evidenció la formación de vacancias de oxígeno ( $V_o$ ) que se relacionan con la activación superficial y la generación de sitios reactivos. Para evaluar su desempeño, se fabricaron electrodos ZnO/Ag y se aplicaron en procesos de electroflotación de agua residual industrial bajo oscuridad y luz visible, promoviendo la formación de especies reactivas de oxígeno (ROS). Los resultados revelaron la transformación de cromóforos y contaminantes complejos, demostrando el potencial de integrar química verde, plasma y procesos fotoasistidos para el tratamiento avanzado de contaminantes emergentes.

## Agradecimientos

La financiación para la síntesis de materiales semiconductores y su caracterización fisicoquímica y electroquímica provino de tres subvenciones: DGAPA-PAPIIT (proyectos IN101025 e IN110825) y SECIHTI CBF-2025-I-1071.

[1] Zagal-Padilla, CK; Diaz-Gomez, C; Gamboa, SA; , Electrochemical characterization of a plasmonic effect ethanol sensor based on two-dimensional ZnO synthesized by green chemistry, MATERIALS SCIENCE IN SEMICONDUCTOR PROCESSING, Volumen: 137, No. , Páginas. -, 2022, 10.1016/j.mssp.2021.106240.

## Incremento de la temperatura de Curie para el compuesto $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ dopado con La.

F. Estrada<sup>1</sup>, O. Navarro<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Biología, Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Av. F. J. Mújica s/n, Cd. Universitaria, Morelia, Michoacán, México.

<sup>2</sup>Unidad Morelia, Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Col. Ex-Hacienda de San José la Huerta, 58190 Morelia, Michoacán, México

Correo electrónico: francisco.estrada@umich.mx

Las dobles perovskitas ferromagnéticas medio-metálicas tienen propiedades que las hacen muy atractivas para una amplia gama de aplicaciones en la espintrónica [1]. En particular, el sistema ferromagnético  $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ , tiene una alta temperatura de Curie  $\sim 450$  K, es medio-metálico y posee una polarización total [2]. Al dopar con La se consigue incrementar la temperatura de Curie en el sistema, aunque también se induce desorden entre los iones de Fe/Mo, el cual compite con el incremento en la temperatura [3]. En este trabajo, estudiamos el efecto del desorden catiónico en la polarización del espín del compuesto  $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$  al reemplazar iones de Sr (2+) por La (3+). Presentamos una aproximación electrónica a partir de la técnica de las funciones de Green y el método de expansión de perturbaciones renormalizadas, donde los espines localizados del Fe y los electrones de conducción del Mo interactúan vía un mecanismo de doble intercambio. El modelo también incluye la correlación electrónica entre los electrones de conducción dentro de la aproximación de campo medio dinámico. Nuestros resultados muestran la influencia del desorden en las propiedades electrónicas y magnéticas en función del dopaje con La en el sistema  $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ .

[1] T. K. Mandal, M. Greenblatt. In Functional oxides. Edited by D. W. Bruce, D. O Hare, R. I. Walton. Wiley, pp. 257-293 (2010).

[2] K. I. Kobayashi, T. Kimura, H. Sawada, K. Terakura, Y. Tokura. Room-Temperature Magnetoresistance in an Oxide Material with an Ordered Double Perovskite Structure. Nature 395, 677 (1998).

[3] F. Estrada, E. J. Guzmán, O. Navarro, M. Avignon. Curie temperature behavior in half-metallic ferromagnetic double perovskites within the electronic correlation picture. Phys. Rev. B 97, 195155 (2018).

# Dinámica de Entrelazamiento y Control en Osciladores Acoplados con Frecuencia Dependiente del Tiempo mediante Invariantes de Ermakov

Roberto Bernal-Jaquez<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Matemáticas Aplicadas y Sistemas, Universidad Autónoma Metropolitana Cuajimalpa*  
Correo electrónico: rbernal@cua.uam.mx

## Resumen

Investigamos la dinámica cuántica de dos osciladores armónicos acoplados con frecuencia dependiente del tiempo ( $\omega(t)$ ). Mediante una transformación a modos normales y el uso de la teoría de invariantes de Lewis-Riesenfeld, junto con la ecuación auxiliar de Ermakov, analizamos la evolución de estados gaussianos bajo modulaciones de frecuencia no adiabáticas. Mostramos que la no conmutatividad entre el invariante de Ermakov y el Hamiltoniano constituye el mecanismo físico responsable de la generación de estados comprimidos y, en consecuencia, de la aparición dinámica de entrelazamiento bipartito entre los osciladores.

Derivamos expresiones analíticas para el parámetro de compresión y para la negatividad logarítmica en términos de las funciones auxiliares de Ermakov, lo que permite estudiar la dinámica del entrelazamiento sin recurrir a aproximaciones perturbativas. Asimismo, comparamos distintas medidas de entrelazamiento para sistemas de variables continuas, en particular la negatividad logarítmica y el criterio de Duan. Finalmente, proponemos un protocolo de control basado en la elección de las condiciones iniciales de la función de Ermakov y en la modulación temporal de la frecuencia. Nuestros resultados muestran que es posible manipular el grado de entrelazamiento en tiempos específicos, proporcionando una ruta analítica para la ingeniería de estados cuánticos en sistemas armónicos acoplados dependientes del tiempo.

- [1] V. Ermakov, Univ. Izv. Kiev, Series III 9 1-25 (1880).
- [2] L. M. Duan et al., "Inseparability Criterion for Continuous Variable Systems," Phys. Rev. Lett., **vol. 84**, p. 2722, 2000.
- [3] H. R. Lewis and W. B. Riesenfeld, "An Exact Quantum Theory of the Time-Dependent Harmonic Oscillator," J. Math. Phys., **vol. 10**, p. 1458, 1969.
- [4] P. Espinoza, Ermakov-Lewis Dynamic Invariants with some applications, IF, Universidad de Guanajuato, 2000
- [5] J. Eisert and M. B. Plenio, "Introduction to the basics of entanglement theory," Int. J. Quant. Inf., **vol. 1**, p. 479, 2003.
- [6] A. M. Perelomov, "Generalized Coherent States and Their Applications," Springer, 1986.
- [7] V. V. Dodonov, "Squeezed states and their applications," J. Opt. B, **vol. 4**, p. R1, 2002.

## **Role of non-extensivity $q$ -parameter in tectonic seismic thermodynamics**

Oscar Sotolongo-Costa<sup>1</sup>, Miguel Eduardo Mora-Ramos<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Centro de Investigación en Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, México*

Correo electrónico: memora@uaem.mx

We propose a linear relationship between the energy of stress-bearing interactions and the contact surface within the fragment-asperity model of earthquakes. This relationship is the only one that yields a simple expression for the total entropy as a function of the non-extensivity parameter,  $q$ . Expressing the total Tsallis entropy in terms of  $q$  identifies a critical range,  $1.4 \lesssim q \lesssim 1.8$ , in which entropy varies strongly. This interval includes most reported values of  $q$  for main shocks worldwide over recent decades, suggesting that  $q$  serves as an indicator of criticality rather than merely a fitting parameter.

## **Estados cuasilocalizados, la importancia de la función de onda**

Luis Manuel Gaggero-Sager

*Centro de Investigación en Ingenierías y Ciencias Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, Cuernavaca, 62209 Morelos, México*

Correo electrónico: lgaggero@uaem.mx

Presentamos algunos resultados en estados cuasilocalizados y discutimos la importancia de calcular la función de onda que permite una discusión más profunda y más interesante en este tipo de estados.

# Efecto de la nanocrystalización en materiales vítreos sustentables luminiscentes dopados con iones de disprosio

José Escorcía García<sup>1</sup>, Carolina Jaanai Saucedo Flores<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Secihti-Cinvestav, Unidad Saltillo, Av. Industria Metalúrgica 1062, Ramos Arizpe 2590, Coahuila, México.*

<sup>2</sup>*Cinvestav, Unidad Saltillo, Av. Industria Metalúrgica 1062, Ramos Arizpe 2590, Coahuila, México.*  
Correo electrónico: [jose.escorcia@cinvestav.edu.mx](mailto:jose.escorcia@cinvestav.edu.mx)

Actualmente, los dispositivos LED son los más utilizados debido a su alta intensidad y eficiencia. Sin embargo, tienen algunos inconvenientes tales como un alto costo debido a la complejidad del proceso para su fabricación, degradación de la resina polimérica y fallo del chip por sobrecalentamiento (~150 °C), los cuales limitan su uso en aplicaciones de alta potencia. Ante esto, los materiales vítreos luminiscentes dopados con tierras raras han surgido como una alternativa para sustituir la resina polimérica gracias a sus interesantes características, tales como una buena solubilidad de las tierras raras y una excelente estabilidad térmica y química [1].

En este trabajo se presenta la síntesis de vidrios de silicato de sodio y calcio dopados con iones de disprosio ( $Dy^{3+}$ ) mediante el proceso de fusión-enfriamiento, usando botellas de vidrio y cáscaras de huevo como materias precursoras. Una vez obtenidos los materiales vítreos, éstos fueron sometidos a un tratamiento de nucleación y cristalización controlado para promover la formación de nanocristales de  $Na_2Ca_3Si_3O_{10}$  dentro de la matriz vítrea [2], esto con el fin de inhibir las transiciones electrónicas de tipo dipolo eléctrico (DE,  $^4F_{9/2} \rightarrow ^6H_{13/2}$ ) de los iones de  $Dy^{3+}$  y con ello, promover las transiciones electrónicas de tipo dipolo magnético (DM,  $^4F_{9/2} \rightarrow ^6H_{15/2}$ ), resultando en una luminiscencia blanca con una temperatura de color correlacionada de 5211 K y coordenadas CIE de (0.34,0.38), cercanas a las coordenadas del blanco estándar (0.33,0.33). Además, se obtuvo que los materiales vítreos nanocrystalizados mostraron un tiempo de vida de ~0.400 ms, es decir, son fosforescentes. Finalmente, se evaluó su estabilidad térmica luminiscente, siendo estables hasta los 250 °C, lo cual los hace aptos para su utilización en aplicaciones LED de alta potencia.

## Agradecimientos

**Agradecemos a Secihti por el apoyo brindado para el desarrollo de la investigación mediante los proyectos CB2016/286160 y PN2016-2738.**

[1] J.D. Musgraves, J. Hu, L. Calvez, Handbook of glass, Springer, Switzerland (2019)

[2] V.E. Ceniros-Orozco, J. Escorcía-García, C.A. Gutiérrez-Chavarría, V. Agarwal, H. Uriel López-Herrera, Orange-reddish photoluminescence enhancement and wollastonite nanocrystals formation induced by CaO in  $Sm^{3+}$ -doped calcium sodium borosilicate glasses, Ceram. Int. 48, 14537 (2022)

## Propiedades ópticas no lineales en pozos cuánticos $\delta$ -dopados dobles con desorden en GaAs

Humberto Noverola-Gamas<sup>1</sup>, Eddy Rabanales-Marquez<sup>1,2</sup>, Luis M. Gaggero-Sager<sup>3</sup>, Outmane Oubram<sup>2</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 Ingenierías, 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*

Correo electrónico: [humberto.noverola@ujat.mx](mailto:humberto.noverola@ujat.mx), [noverola86@gmail.com](mailto:noverola86@gmail.com)

Los dispositivos optoelectrónicos de baja dimensionalidad dependen en gran medida de las correctas técnicas y precisión en su síntesis, tal y como ocurre con la MEB [1-3]. En el presente trabajo se evalúa teóricamente el impacto del desorden estructural en los coeficientes ópticos no lineales (NOR, SHG y THG) de pozos cuánticos asimétricos de GaAs con dopaje  $\delta$  tipo  $n$ . Modelamos la estructura electrónica resolviendo la ecuación de Schrödinger en el marco del método de Thomas-Fermi [4, 5] y calculamos la respuesta óptica mediante el formalismo de la matriz densidad [4-6]. Para evaluar la robustez de los coeficientes ópticos, simulamos 5,000 configuraciones aleatorias introduciendo fluctuaciones del 10%, 20% y 30% en tres parámetros del sistema: la densidad de impurezas en el plano dopante, la distancia intercapas y campo eléctrico externo. Los resultados revelan respuestas contrastantes: mientras SHG y THG son notablemente robustos (conservando su pico resonante ante fluctuaciones de hasta 20% en el dopaje), NOR es extremadamente sensible a variaciones en la distancia entre capas, sufriendo una atenuación severa y un desplazamiento por interferencia destructiva. Sorprendentemente, el desorden en el campo eléctrico externo mostró un impacto nulo en los tres coeficientes.

### Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo de la secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación de México (SECIHTI), de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco (beca PISA 2024-1 UJAT), así como los recursos computacionales y la experiencia técnica proporcionados por el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS, Grupo de Laboratorios Nacionales CONAHCyT) bajo el proyecto No. 202403063N.

- [1] M. Henini, Molecular beam epitaxy, *Thin Solid Films* **306**, 331 (1997).
- [2] F. Joint, *et al.*, GaAs manufacturing processes conditions for micro-and nanoscale devices, *Journal of Manufacturing Processes* **60**, 666 (2020).
- [3] H. Dakhlaoui, *et al.*, Numerical study of optical absorption coefficients in mangning-like AlGaAs/GaAs double quantum Wells, *Physica E* **147**, 115623 (2023).

[4]

- [5] H. Sayrac, *et al.*, Modulation of nonlinear optical rectification, second, and third harmonic generation coefficients in n-type quadruple  $\delta$ -doped GaAs quantum wells under external fields. *Physica B* **690**, 416252, (2024).
- [6] E. Rabanales-Marquez, H. Noverola-Gamas, O. Oubram, L. M. Gaggero-Sager, Effects of dopant interlayer distance, magnetic field and electric field on nonlinear optical rectification, second and third harmonic generation in double  $\delta$ -doped quantum Wells, *Solid State Communications* **403**, 115951, (2025).
- [7] H. Noverola-Gamas, L. M. Rojas, S. Azalim, O. Oubram. Disorder effect on intersubband optical absorption of n-type  $\delta$ -doped quantum well in GaAs. *Journal of Physics: Condensed Matter* **40**, 405602, (2023).

## **Control de la absorción óptica lineal y no lineal mediante campos eléctricos y magnéticos en anillos cuánticos toroidales core-shell de GaAs/AlGaAs.**

Belén Eugenia Maldonado Villa<sup>1</sup>, Karla Arely Rodríguez Magdaleno<sup>1,2</sup>, Rebeca Victoria Herrero Hahn<sup>3</sup>, Carlos Alberto Duque Echeverri<sup>4</sup>, Juan Carlos Martínez Orozco<sup>1</sup>.

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

<sup>2</sup>*Laboratorio de Ciencias Forenses, Unidad Académica de Derecho, Universidad Autónoma de Zacatecas, Ramón López Velarde 117, Lomas del Patrocinio, 98068, Zac., Zacatecas, Mexico.*

<sup>3</sup>*Departamento de Electrónica y Tecnología de Computadores, Facultad de Ciencias, Universidad de Granada, Granada, España.*

<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.*

Correo electrónico:

En este trabajo, reportamos los coeficientes de absorción óptica lineal y no lineal de un anillo cuántico core-shell de GaAs/AlGaAs bajo la influencia de campos eléctricos y magnéticos externos. El sistema se modela dentro de la aproximación de masa efectiva, asumiendo bandas de energía parabólicas y simetría axial. La ecuación de la función envolvente se resuelve mediante el método de elementos finitos. Se analiza de manera sistemática la dependencia de los niveles de energía, los elementos de matriz dipolar y los coeficientes de absorción óptica con respecto a las intensidades de los campos eléctrico y magnético aplicados. Los resultados muestran que tanto el campo eléctrico como el campo magnético inducen un marcado corrimiento hacia el azul (blueshift) en las energías de transición. Además, su efecto combinado permite una mayor capacidad de ajuste de los picos de resonancia en el espectro de absorción.

### **Agradecimientos**

B.E. Maldonado-Villa agradece el apoyo de la SECIHTI por la beca con número CVU-1010826. K.A. Rodríguez-Magdaleno agradece el financiamiento a través del proyecto CBF-2025-I-3459, titulado “Desde el confinamiento cuántico a la funcionalidad: estudio de las propiedades eléctricas, ópticas de nanoestructuras sus aplicaciones”, un proyecto financiado por la SECIHTI en 2025.

## Baterías de iones, perovskitas y modelado

E. Carvajal<sup>1</sup>, J.E. Antonio<sup>2</sup>, J.M. Cervantes<sup>3</sup>, H. Muñoz<sup>3</sup>, J.L. Rosas<sup>4</sup>, M.A. Montufar<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica-Culhuacán, Instituto Politécnico Nacional, Av. Santa Ana 1000, Ciudad de México, 04440, México*

<sup>2</sup> *Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 70-399, Ciudad de México, 04510, México*

<sup>3</sup> *Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, A.P. 70-360, Ciudad de México, 04510, México*

<sup>4</sup> *Universidad Autónoma Metropolitana, Unidad Iztapalapa, Av. San Rafael Atlixco 186, Col. Vicentina, Ciudad de México, 09340, México*

Correo electrónico: [ecarvajalq@ipn.mx](mailto:ecarvajalq@ipn.mx), [eliel.carvajal@gmail.com](mailto:eliel.carvajal@gmail.com)

Transitar hacia el uso de energía que provenga de fuentes con menor impacto ambiental implica, entre otras cosas, el uso de dispositivos que permitan almacenar la energía en cuestión. La necesidad de almacenamiento se vincula a diversos factores, pero destaca la diferencia entre los momentos en que se cosecha la energía y se le proporciona al consumidor. Adicionalmente, la demanda puede no ser uniforme. En ese contexto, diversos compuestos con estructura tipo perovskita han evidenciado su utilidad en la estructura de las baterías, pues se requieren conductores electrónicos tanto como conductores iónicos, para los electrodos y el electrolito respectivamente; además, las estructuras deben ser estables en el intervalo de temperatura en que operen los dispositivos y deben tener parámetros de red compatibles, para reducir los esfuerzos y la fatiga de los materiales. Más aún, la arquitectura de las baterías en estado sólido impulsa la exploración de los cambios que sufren las propiedades físicas cuando se confinan nanométricamente los compuestos. Debido a estos antecedentes, y buscando tener la mejor relación entre la densidad energética y la densidad gravimétrica, en el grupo no hemos encargado de modelar diferentes compuestos ( $\text{CaSnO}_3$ ,  $\text{SrZnO}_3$ ,  $\text{EuFeO}_3$ ,  $\text{GdTiO}_3$ ,  $\text{LaTiO}_3$ ,  $\text{CaGeO}_3$ ,  $\text{SrSnO}_3$ ,  $\text{YTiO}_3$ ,  $\text{SrNbO}_3$ ,  $\text{GaCaCl}_3$ ) para calcular sus propiedades físicas y definir el área en la que podrían tener el mejor desempeño. Usualmente comenzamos estudiando los compuestos prístinos y en bulto, para transitar posteriormente hacia las soluciones sólidas y los sistemas confinados. Para algunos de los casos también se realiza la síntesis de los compuestos. Las optimizaciones geométricas y el cálculo de las propiedades se realizan en el marco de la Teoría del Funcional de la Densidad, en tanto que la síntesis de los compuestos se realiza por reacción al estado sólido o por el método de las sales fundidas.

### Agradecimientos

Este trabajo fue apoyado por el proyecto IPN-SIP-MULTI-2026-0038. J. L. Rosas agradece la beca posdoctoral proporcionada por la SECIHTI.

# MoS<sub>2</sub>/g-C<sub>3</sub>N<sub>4</sub> Heterojunction Single-Atom Catalysts for Hydrogen Evolution and Oxygen Evolution Reactions: A Density Functional Theory Study

Ahmed Al-Shami<sup>1\*</sup>, Thomas Stegmann<sup>1\*</sup>

<sup>1</sup> *Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Cuernavaca, México*

Email: [al-shami@icf.unam.mx](mailto:al-shami@icf.unam.mx), [stegmann@icf.unam.mx](mailto:stegmann@icf.unam.mx)

## Abstract:

Integrating single-atom catalysts (SACs) into MoS<sub>2</sub>/g-C<sub>4</sub>N<sub>3</sub> heterojunctions is a powerful strategy for achieving highly efficient, atomically precise electrocatalytic systems. MoS<sub>2</sub> provides sulfur vacancies and tunable edge sites that facilitate charge transport, while g-C<sub>4</sub>N<sub>3</sub> offers a nitrogen-rich scaffold with strong anchoring sites for transition-metal single atoms (Pt, Ru, Fe, Co, Ni, and Cu). The intimate interfacial coupling establishes a built-in electric field and favorable band alignment that promotes charge separation and suppresses recombination. Using density functional theory (DFT) with PBE+U+D3 corrections as implemented in Quantum ESPRESSO, combined with Phonopy finite-displacement calculations and the Computational Hydrogen Electrode (CHE) framework, we compute the Gibbs free energy of hydrogen adsorption ( $\Delta G_p^*$ ) for each SAC on the MoS<sub>2</sub>/g-C<sub>4</sub>N<sub>3</sub> support. Zero-point energy (ZPE) and thermal corrections obtained from vibrational frequency calculations yield  $\Delta G_p^* = -0.066$  eV for Pt,  $+0.097$  eV for Ru,  $-0.163$  eV for Fe,  $+0.268$  eV for Ni,  $+0.317$  eV for Co, and  $+0.467$  eV for Cu. Anchoring single atoms at S-vacancies or N-coordination sites maximizes atom utilization and optimizes the d-band center, which tailors the adsorption energies of key reaction intermediates. The exchange current density, calculated from the Nørskov volcano model, ranks Pt > Ru > Fe as the most active catalysts for the hydrogen evolution reaction (HER), approaching the thermodynamic optimum ( $\Delta G_p^* = 0$  eV). The oxygen evolution reaction (OER) overpotentials are further analyzed to evaluate bifunctional activity. Overall MoS<sub>2</sub>/g-C<sub>4</sub>N<sub>3</sub>-supported SACs represent a versatile platform for electrocatalytic water splitting, and the combined DFT–phonon thermochemistry workflow established here provides a reliable screening protocol for future rational catalyst design.

## Keywords:

Single-atom catalysts, MoS<sub>2</sub>, g-C<sub>4</sub>N<sub>3</sub>, heterojunction, hydrogen evolution reaction (HER), oxygen evolution reaction (OER), density functional theory (DFT), d-band center, Computational Hydrogen Electrode, transition metals, electrocatalysis

## **Nanoestructuras semiconductoras para generación de energía y almacenamiento y detección molecular: estudios a primeros principios**

A. Trejo, A. Miranda, F. Salazar, M. Cruz-Irisson

*Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacan, Av. Santa Ana 1000 col. San Francisco Culhuacan  
04440 CDMX, México*

Correo electrónico: atrejoba@ipn.mx

En los últimos años, el avance de la nanociencia ha permitido el desarrollo de múltiples aplicaciones en dispositivos electrónicos, biomedicina, recubrimientos impermeables, entre otros. Estos desarrollos han estado, en parte, impulsados por herramientas de modelado y simulación, así como por avances teóricos como la teoría de la densidad funcional (DFT). Debido a su amplia superficie reactiva y a efectos cuánticos, las capas de espesor atómico, los nanoalambres y los semiconductores nanoporosos han sido identificados como candidatos a nuevas aplicaciones en la detección molecular de gases tóxicos y de biomarcadores de enfermedades, así como en el almacenamiento y la generación de energía mediante baterías de iones, celdas solares y almacenamiento de hidrógeno. Como ha sucedido en otras aplicaciones, es necesario contar con un modelado teórico de las propiedades físicas de estos materiales para acelerar su desarrollo e identificar los más adecuados para estas aplicaciones. En este trabajo se presentan los resultados de estudios sobre las propiedades, electrónicas, ópticas, vibracionales, y mecánicas de semiconductores nanoestructurados en monocapas, nanoalambres y sistemas nanoporosos con aplicaciones a baterías de iones de Li y Na, almacenamiento de hidrógeno, y detección molecular de gases tóxicos y biomarcadores como acetona para la detección de diabetes. Todo en el marco de la DFT y el método de superceldas [1-2]. Los resultados demuestran que las distintas nanoestructuras presentan diferentes oportunidades en estas aplicaciones; por ejemplo, las monocapas mejoran sus propiedades de adsorción y detección mediante mecanismos de funcionalización y dopaje superficiales, mientras que los nanoalambres y las estructuras nanoporosas tienen una amplia promesa en el almacenamiento de iones de Li y Na y en el almacenamiento de hidrógeno.

### **Agradecimientos**

Este trabajo fue financiado por proyectos multidisciplinarios e individuales de la SIP-IPN

- [1] J. A. Moreno-Banda, F. Salazar, A. Trejo-Baños, A. Miranda, L. A. Pérez, M. Cruz-Irisson, DFT study of electronic properties of Ge nanowires with Na as potential anodic materials, *Chemical Engineering Journal* **534**. (2026)
- [2] DFT study of CO and O<sub>2</sub> capture on silicon carbide monolayers decorated with alkali-metal atoms, *Japanese Journal of Applied Physics Journal* **64**. (2025)

## RESÚMENES DE PRESENTACIONES – SESIÓN DE ENERGÍAS RENOVABLES

### **Celdas solares de segunda generación: principales desafíos que enfrentan algunas de las tecnologías establecidas y emergentes.**

E. Regalado Pérez<sup>1</sup>, N.R. Mathews<sup>2</sup>, Xavier Mathew<sup>2\*</sup>

*<sup>1</sup>Instituto de Física, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, Puebla, México.  
Instituto de Energías Renovables*

*<sup>2</sup>Universidad Nacional Autónoma de México, Temixco, Morelos 62580, México*

\* [xm@ier.unam.mx](mailto:xm@ier.unam.mx)

Esta década fue testigo de avances muy alentadores y prometedores en tecnologías fotovoltaicas a escala de laboratorio y comerciales, superando las barreras de eficiencia y el hito de la capacidad fotovoltaica instalada de TW. Las celdas solares de primera y segunda generación vieron dispositivos de área pequeña que se acercaban al límite SQ, y los paneles fotovoltaicos disfrutaron de una eficiencia superior al 20 %. Sin embargo, hay algunas factoras importantes que afecta la eficiencia tanto de las tecnologías fotovoltaicas establecidas como de las emergentes: el déficit de voltaje, perdida por recombinación en la superficie, y la respuesta azul. La perdida en respuesta azul es notable cuando el emisor o la capa buffer absorben en esta región. En los dispositivos tradicionales de unión p-n, esta absorción de la capa buffer enmascara la pérdida por recombinación superficial. Las pérdidas de fotones azules pueden mitigarse hasta cierto punto mediante una gestión adecuada de la luz. Este trabajo presenta los factores limitantes de  $V_{OC}$  en celdas solares inorgánicas de película delgada, los mecanismos, algunos resultados y un estudio de caso con CdTe. Se analiza el papel de las interfaces frontal y posterior. También se incluye una discusión sobre el desplazamiento descendente de luminiscencia como un enfoque novedoso para evitar absorción en las capas superficiales y lograr una mayor eficiencia cuántica y, por lo tanto, una mayor corriente de cortocircuito.

## **Flexible p-SnSe/n-SnSe<sub>2</sub> thin-film thermoelectric elements produced via vacuum thermal evaporation**

Fabiola De Bray Sánchez, M. T. S. Nair

*Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México*

Tin selenide (SnSe) has attracted increasing attention as a thermoelectric material due to its excellent properties and its potential for use in lightweight, non-toxic, and scalable portable devices. However, the fabrication of SnSe thin film using scalable vacuum deposition techniques remains challenging, as it often leads to mixed-phase compositions such as SnSe–SnSe<sub>2</sub>–Sn<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>. These phases have uncertain p or n type electrical conductivities ( $\sigma$ ), which limit their commercial viability. In this work, the conditions to obtain orthorhombic (ORT) SnSe thin films with a thickness of 200 nm were established using vacuum thermal evaporation on glass and polyimide flexible substrates. By controlling the substrate temperature and deposition rate, p-type SnSe thin films with electrical conductivity values of 0.14–0.18  $\Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$  were obtained. Subsequent selenium-assisted thermal processing at 280 °C transformed the films into n-type SnSe<sub>2</sub> with electrical conductivity values ranging from 2.3 to 8.4  $\Omega^{-1} \text{ cm}^{-1}$ . The Seebeck coefficient varied from +510 to +620  $\mu\text{V K}^{-1}$  for the p-SnSe films and from –390 to –420  $\mu\text{V K}^{-1}$  for the n-SnSe<sub>2</sub> films, confirming the formation of complementary p/n thermoelectric elements from the same Sn–Se system. Flexible thermoelectric generator was made using interconnected p-SnSe/n-SnSe<sub>2</sub> strips of the films deposited on polyimide foil. Since the p-n components were prepared at 200 to 280 °C, the device was thermally stable. Hence, it may be suitable for room temperature operation in portable thermoelectric applications.

## **Impacto de la Ruta de Procesamiento Térmico en Celdas Solares de CdTe**

Cesar Hernandez Vasquez<sup>1</sup>, Uriel Ramírez Acosta<sup>2</sup>, Michelle Atenea Llarena Tello<sup>2</sup>, José Manuel Flores Marquez<sup>3</sup>, Miguel Ángel González Trujillo<sup>1</sup>, María de Lourdes Albor Aguilera<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Politécnico Nacional-ESCOM, Depto. De Formación Básica, UPALM Zacatenco, 07738, CDMX, México*

<sup>2</sup>*Instituto Politécnico Nacional-ESIME, Depto. de Fotónica, 07738, UPALM Zacatenco, CDMX, México*

<sup>3</sup>*Instituto Politécnico Nacional-ESIQIE, Depto. de Ing. en Metalurgia y Materiales, 07738, UPALM Zacatenco, CDMX, México*

<sup>4</sup>*Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México*

Correo electrónico: chernandezva@ipn.mx

Este estudio investiga la optimización de celdas solares de CdTe mediante el uso de tratamientos térmicos con cloruros de cadmio ( $\text{CdCl}_2$ ), magnesio ( $\text{MgCl}_2$ ) y telurio ( $\text{TeCl}_4$ ) como alternativas al convencional cloruro de cadmio. Los tratamientos térmicos fueron evaluados utilizando dos métodos de aplicación: la sublimación en espacio cerrado (CSV) y el depósito por pulverización (spray), seguidos de un recocido a 400 °C en mufla. Los resultados demuestran que estas técnicas promueven la recristalización y el crecimiento de grano, reduciendo significativamente la resistividad eléctrica del material absorbente. El análisis estructural confirmó que la activación con cloro pasiva los defectos en los bordes de grano mostrando un análisis de las microdeformaciones y tamaño de cristalita antes y después del tratamiento térmico, mejorando el transporte de portadores de carga. Las celdas fabricadas con  $\text{MgCl}_2$  alcanzaron eficiencias de hasta el 13%, consolidándose como una opción ecológica y económica frente a compuestos tóxicos. En conclusión, el trabajo valida rutas de procesamiento escalables que mantienen un alto rendimiento fotovoltaico minimizando el impacto ambiental.

### **Agradecimientos**

*CHV agradece el apoyo de los proyectos SIP 20260333, SIP 20260327, 20260328, 20260189 del IPN, CHV y JMFM agradecen a SECIHTI-México.*

## Optimización Energética en la Germinación de Fresa Implementando Materiales Poliméricos a Base de Quitosano

Ingrid Daniela Cruz Mejía<sup>1\*</sup>, Christian Jiménez Campero<sup>1</sup>, María de Lourdes Albor Aguilera<sup>1</sup>

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

Correo electrónico: [\\*icruz1902@alumno.ipn.mx](mailto:icruz1902@alumno.ipn.mx)

El aumento de emisiones de CO<sub>2</sub> en los últimos años, debido al desperdicio de alimento ha orientado la investigación al desarrollo de una agricultura sostenible. La fresa (*fragaria x ananassa*), es un fruto altamente perecedero, principalmente durante su germinación, ya que se enfrenta a problemáticas como, tasas de germinación bajas, tiempo prolongado de desarrollo y amenazas patogénicas. Por esta razón, los agricultores optan utilizar estolones o plantas jóvenes para propagar fresas. Sin embargo, la desventaja de este método consiste en que los estolones, suelen estar infectados previamente por patógenos como el hongo gris, como consecuencia de una falta de control durante su germinación, generando pérdidas de recursos no solo económicos, si no también recursos hídricos y energéticos. El presente trabajo se enfoca en buscar alternativas sostenibles que optimicen recursos y reduzcan pérdidas durante la germinación de semilla de fresa. Llevar a cabo la germinación dentro de un invernadero, permite controlar las condiciones necesarias para una germinación óptima, favoreciendo el desarrollo de la semilla de fresa y optimizando recursos. Además, se propone el uso de un polímero a base de quitosano como material biodegradable, biocompatible y antifúngico, como alternativa sustentable a los pesticidas convencionales, cuya producción requiere procesos industriales de alto consumo energético y genera contaminación ambiental debido al uso de compuestos químicos.

**Keywords:** Eficiencia Energética, Agricultura Sostenible, Fresa, Hongo gris, Quitosano

**Agradecimientos:** Proyecto SIP 20260189, SECIHTI

[1] United Nations. (s.f.). ¿Qué es el cambio climático? | Naciones Unidas. <https://www.un.org/es/climatechange/what-is-climate-change>

[2] Tiwari, V., Tiwari, A., Banik, B. K., & Sahoo, B. M. (2024). Solar-powered chemistry: new catalytic solutions for a greener planet. In Elsevier eBooks (pp. 161–182). <https://doi.org/10.1016/b978-0-443-16164-3.00009-1>

[3] Food loss and waste account for 8-10% of annual global greenhouse gas emissions; cost USD 1 trillion annually. (n.d.). UNFCCC. <https://unfccc.int/news/food-loss-and-waste-account-for-8-10-of-annual-global-greenhouse-gas-emissions-cost-usd-1-trillion>

[4] Renewable energy | Energy | Food and Agriculture Organization of the United Nations. (2026, February 3). Energy. <https://www.fao.org/energy/areas-of-work/renewable-energy-for-agriculture/en>

[5] Lira Ortiz, R., & Ruiz Rivas, M. (2023, noviembre). PRODUCCIÓN DE PLANTAS DE FRESA CON CALIDAD GENÉTICA, FISIOLÓGICA y FITOSANITARIA. [PDF]. Recuperado 14 de julio de 2025, de <https://vun.inifap.gob.mx>

[6] Boamah, P. O., Onumah, J., Aduguba, W. O., & Santo, K. G. (2023). Application of depolymerized chitosan in crop production: A review. International Journal of Biological Macromolecules, 235, Artículo 123858. <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0141813023007523>

## Depósito por Baño Químico Termostático de CdS dopado con Ag: Análisis estructural por GIXRD

JM Flores-Márquez<sup>1</sup>, AR Andrade-Plata<sup>2</sup>, C Hernández-Vásquez<sup>3</sup>, MA González-Trujillo<sup>3</sup>, ML Albor-Aguilera<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Instituto Politécnico Nacional-ESIQIE, Depto. de Ing. en Metalurgia y Materiales, 07738, UPALM Zacatenco, CDMX, México.

<sup>2</sup>Instituto Politécnico Nacional-ESIQIE, Depto. de Ing. Química Industrial, 07738, UPALM Zacatenco, CDMX, México.

<sup>3</sup>Instituto Politécnico Nacional-ESCOM, Depto. De Formación Básica, UPALM Zacatenco, 07738, CDMX, México.

<sup>4</sup>Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México.

Correo electrónico: [jfloresm@ipn.mx](mailto:jfloresm@ipn.mx) (JM Flores-Márquez)

En el presente trabajo se analizan las consecuencias estructurales de la introducción de iones de Ag por medio de un proceso de dopaje in situ empleando un medio adecuado como lo es el depósito por baño químico termostático (DBQ) sobre un sustrato FTO (SnO<sub>2</sub>:F) a 75°C con diferentes concentraciones de la solución dopante y número de agregados. El depósito in situ del CdS por DBQ utiliza CdCl<sub>2</sub> (0.1 M) y SC(NH<sub>2</sub>)<sub>2</sub> (0.3 M) como soluciones precursoras, NH<sub>4</sub>Cl (0.2 M) y NH<sub>4</sub>OH (2 M) son usados para la promover agentes complejos, AgNO<sub>3</sub> se usa como fuente de Ag. Se realizaron mediciones de transmitancia por espectroscopia UV-Vis a muestras de CdS dopadas con diferentes concentraciones de Ag y número de agregados para analizar los cambios del material ventana ocasionados por el dopaje, obteniendo un incremento en el valor promedio de la transmitancia, así como un incrementando en el valor de brecha de energía prohibida antes y después del tratamiento térmico en mufla respecto de la referencia, resultados favorables en las características del CdS, adicionalmente, los valores de los parámetros de red y volumen de la celda unitaria se incrementaron, acercándose más a los valores reportados por la carta PDF 041-1049, así mismo, se calcularon los valores de las microtensiones y la cristalita mediante el método de Williamson Hall, obteniendo modificaciones significativas cuando se depositan las muestras de CdS con dopajes de Ag, el análisis se hizo a través de mediciones por GI-XRD a 0.2°.

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

### Agradecimientos

*JMFM agradece el apoyo de los proyectos SIP 20260189, 20260327, 20260328 y 20260333 del IPN, JMFM y CHV agradecen a SECIHTI-México.*

## Ingeniería de interfaces en celdas solares de SnS depositadas por baño químico.

Fernando Ayala Mató, MTS Nair

*IER - UNAM*

### Resumen:

El presente trabajo se centra en la ingeniería de interfaces dentro de una arquitectura tipo superestrato en celdas solares de SnS depositadas por la técnica de baño químico. Sobre un FTO comercial se depositó una bicapa de ZnS/CdS como ventana, una heteroestructura de SnS-CUB/SnS-ORT como absorbedor y finalmente una capa muy delgada de  $\text{Cu}_{1.78}\text{Se}$  como interfaz selectiva entre el absorbedor y el contacto trasero. La estructura propuesta busca reducir la absorción parásita y el contenido de cadmio mediante el uso de una bicapa ZnS/CdS, al mismo tiempo que se aprovecha la combinación de fases cúbica y ortorrómbica del SnS para mejorar la absorción óptica y sostener voltajes de circuito abierto superiores a 0.5 V. Además, se estudió el papel de la capa  $\text{Cu}_{1.78}\text{Se}$  como contacto posterior selectivo o capa tipo BSF, orientada a favorecer la colección de portadores y disminuir pérdidas por recombinación en la interfaz posterior. Los resultados muestran que la incorporación de  $\text{Cu}_{1.78}\text{Se}$  incrementa significativamente la densidad de corriente de cortocircuito y el factor de llenado, alcanzando una eficiencia máxima de 2.29 %, en comparación con 0.56 % para la celda sin esta interfaz. Estos resultados evidencian que el control de ventanas, absorbedores e interfaces posteriores es una ruta viable para mejorar el desempeño de celdas solares de SnS fabricadas mediante procesos químicos de bajo costo.

**Palabras clave:** SnS; celdas solares de película delgada; depósito por baño químico; ZnS/CdS;  $\text{Cu}_{1.78}\text{Se}$ ; ingeniería de interfaces.

## Comparación de los parámetros eléctricos de celdas solares de CdTe usando CdS y/o In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> como material ventana

María de Lourdes Albor-Aguilera<sup>1\*</sup>

César Hernandez-Vasquez<sup>2</sup>, Miguel Ángel González-Trujillo<sup>2</sup>

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

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

[\\*mlalbor@ipn.mx](mailto:*mlalbor@ipn.mx)

Tradicionalmente, el sulfuro de cadmio (CdS) ha sido el material ventana más utilizado en la fabricación de celdas solares fotovoltaicas, tiene un ancho de banda prohibida de aproximadamente 2.42 eV a temperatura ambiente, lo que le permite ser altamente transparente a gran parte de la radiación visible y absorber principalmente la radiación ultravioleta. Esta característica es fundamental para su función como material ventana, ya que facilita el paso de la luz hacia la capa absorbente de la celda solar, donde se genera la mayor parte de los portadores de carga; sin embargo, la presencia de cadmio, un elemento tóxico, y las pérdidas ópticas asociadas a su banda prohibida han motivado la búsqueda de materiales alternativos. En este contexto, el trisulfuro de indio (In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) ha surgido como un material promisorio por ser libre de cadmio, presentar una banda prohibida más amplia (2.0–2.8 eV), alta transmitancia óptica en la región visible y una buena compatibilidad con diversos materiales absorbentes como CdTe, CIGS y perovskitas. El CdS y el In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> puede depositarse mediante métodos económicos y escalables, tales como baño químico, pulverización catódica, evaporación térmica y depósito por aerosol pirolítico.

En el presente trabajo se presenta una revisión comparativa de las propiedades estructurales, morfológicas, ópticas y eléctricas de películas delgadas de CdS e In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> depositados por baño químico y posteriormente utilizadas como material ventana en el desarrollo de dispositivos fotovoltaicos del tipo CdTe. Los resultados reportados indican que, el CdS puede ser sustituido por el In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> y con ello disminuir el impacto ambiental derivado de este tipo de tecnologías.

**Palabras clave:** CdS, In<sub>2</sub>S<sub>3</sub>, celdas solares, impacto ambiental.

**Agradecimientos:** Este trabajo fue apoyado por los proyectos SIP 20260189 y SIP 20260328.

### Referencias:

[1] Galarza-Gutiérrez, U., Albor-Aguilera, M. L., González-Trujillo, M. A., Hernández-Vásquez, C., Ortega-Cárdenas, J. A., Flores-Márquez, J. M., Cruz-Gandarilla, F., Ramírez-Rosales, D., Mendoza-Pérez, R., Rueda-Morales, G., et al. (2019). *Incorporation of an efficient  $\beta$ -In<sub>2</sub>S<sub>3</sub> thin film as window material into CdTe photovoltaic devices*. *Materials Research Express*, 6(12). <https://doi.org/10.1088/2053-1591/ab5508>

- [2] Dharmadasa, I. M., & Ojo, A. A. (2017). *Unravelling complex nature of CdS/CdTe based thin film solar cells*. Journal of Materials Science: Materials in Electronics, 28, 16598–16617. <https://doi.org/10.1007/s10854-017-7615-x>
- [3] Medina-Bautista, A. E., Albor-Aguilera, M. L., & Maykel Courel (2025). Numerical analysis of ultra-thin CdTe solar cell: an optimized design of polymer materials as HTLs. Physica Scripta. Este trabajo utiliza simulaciones SCAPS para optimizar capas transportadoras de huecos y alcanzar eficiencias cercanas al 23 %.
- [4] Manir, M., Genç, G., Nevruzoglu, V., & Tomakin, M. (2025). Optimizing CdS thin films as optical windows in solar cells: A comparative study of cryogenic and classical techniques. Applied Physics A, 131, 448. <https://doi.org/10.1007/s00339-025-08572-1>

## Materiales basados en cobre aplicados como HTL en celdas solares de CdTe

Alejandro Emmanuel Medina-Bautista<sup>1</sup>, María de Lourdes Albor-Aguilera<sup>1</sup>, and Maykel Courel<sup>2</sup>

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

<sup>2</sup> Centro Universitario de los Valles (CUValles), Universidad de Guadalajara, Ameca, Jalisco 46600, México

Correo electrónico: [amedinab1400@alumno.ipn.mx](mailto:amedinab1400@alumno.ipn.mx),  
[alejandroemanuelmedinabautist@gmail.com](mailto:alejandroemanuelmedinabautist@gmail.com)

Se investigó la aplicación de capas transportadoras de hueco (HTL) a base de cobre en celdas solares de CdTe mediante simulaciones SCAPS unidimensionales con la arquitectura FTO/CdS/CdTe/HTL/Cu:Cu, obteniéndose una gran concordancia con los resultados experimentales. La incorporación de HTL permite valores de tensión en circuito abierto de alrededor de 800 mV y rendimientos superiores al 9.5 %. Los resultados identifican el desplazamiento de la banda de valencia en la interfaz CdTe/HTL como el parámetro clave que limita el rendimiento y que gobierna la recombinación interfacial, la selectividad de portadores y el rendimiento del dispositivo. Una alineación óptima en forma de pico con un valor de entre 150 y 250 meV maximiza la extracción de huecos al tiempo que suprime las pérdidas por recombinación, mientras que las alineaciones no ideales introducen vías de recombinación o barreras de transporte que degradan el rendimiento. Entre los HTL evaluados (CuI, CBTS, CZGS y CZGSe), la ingeniería de alineación precisa de bandas constituye la estrategia fundamental para lograr células solares de CdTe de alta eficiencia. Mediante la optimización de las propiedades del HTL y de las resistencias de los dispositivos, la eficiencia de conversión de potencia se mejora en aproximadamente un 17 %.

**Keywords:** CdTe, CuI, CBTS, CZGS y CZGSe, HTL layer.

**Agradecimientos:** Proyecto SIP 20260189, SECIHTI, BEIFI

- [1] Chowdhury, T. A. (2024). SCAPS numerical modeling of CBTS/WO<sub>3</sub> thin film solar cell. *Optics Continuum*, 3(11), 2190–2217. <https://doi.org/10.1364/OPTCON.536545>
- [2] Khan, T. M., Khatun, M. M., Khatun, H., Hosen, A., & al Ahmed, S. R. (2023). Design and Simulation of a Highly Efficient SnSe Solar Cell with CuI as an HTL by SCAPS-1D. 5th IEEE International Conference on Telecommunications and Photonics, ICTP 2023 - e-Proceedings. <https://doi.org/10.1109/ICTP60248.2023.10490748>
- [3] Jamil, M., Ali, A., Mahmood, K., Arshad, M. I., Tahir, S., Ajaz un Nabi, M., Ikram, S., Amin, N., & Hussain, S. (2020). Numerical simulation of perovskite/Cu<sub>2</sub>Zn(Sn<sub>1-x</sub>Gex)S<sub>4</sub> interface to enhance the efficiency by valence band offset engineering. *Journal of Alloys and Compounds*, 821. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.153221>
- [4] Chris, A. B., Lenka, A., & Routray, S. (2025). Performance enhancement of quantum well photosensitive device: role of Silicon in Copper–Zinc–Germanium–Sulfide/Selenide. *Microsystem Technologies*, 31(12), 3823–3834. <https://doi.org/10.1007/s00542-025-05953-7>

## Estudio morfológico y estructural de películas nanoestructuradas de ZnTe para aplicaciones fotovoltaicas en celdas solares de tipo CdTe

Christian Jiemenez-Campero<sup>1\*</sup>, Miguel ángel González-Trujillo<sup>2</sup>, César Hernández-Vázquez<sup>2</sup>, Paulina Díaz Leal-Cortina<sup>1</sup>, Jesús Adán Fierro López<sup>1</sup>, María de Lourdes Albor-Aguilera<sup>1\*\*</sup>

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

<sup>2</sup> Instituto Politécnico Nacional-ESCOM, Depto. Ciencias Básicas, San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México.

Correo electrónico: [cjienezc1001@alumno.ipn.mx](mailto:cjienezc1001@alumno.ipn.mx)\*, [lalbora@ipn.mx](mailto:lalbora@ipn.mx)\*\*

El telururo de zinc (ZnTe) es un semiconductor con propiedades atractivas para aplicaciones fotovoltaicas, particularmente como capa transportadora de huecos (HTL) en celdas solares basadas en CdTe. Este material presenta una brecha de energía de aproximadamente 2.27 eV y conductividad eléctrica tipo p, características que lo convierten en un candidato prometedor para mejorar el transporte de carga en dispositivos fotovoltaicos de segunda generación.

En este trabajo se estudió la deposición de películas delgadas micro y nanoestructuradas de ZnTe mediante la técnica Close-Spaced Vapor Transport (CSVST), con el propósito de evaluar su posible implementación en celdas solares con estructura FTO/CdS/CdTe/ZnTe/Au:Cu. Se analizaron diferentes condiciones de depósito para favorecer la formación de nanoestructuras y estudiar su comportamiento tanto en dispositivos con tratamiento térmico de CdCl<sub>2</sub> como sin él.

Las películas obtenidas presentaron espesores cercanos a 140 nm. Asimismo, se caracterizaron sus propiedades morfológicas y estructurales mediante microscopía de fuerza atómica (AFM) y difracción de rayos X (DRX), respectivamente. Los resultados obtenidos muestran el potencial del ZnTe como capa HTL en dispositivos fotovoltaicos basados en CdTe.

**.Keywords:** CdTe, ZnTe, solar cells, HTL layer, CSVST.

**Agradecimientos:** Proyecto SIP 20260328 y 20260189, SECIHTI, BEIFI

- [1] Cruz, L. R., Oliveira, R. M., & Ferreira, C. L. (2021). Growth and characterization of CdTe thin films deposited by close-spaced vapor transport: A review. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 32(15), 19821-19835. <https://doi.org/10.1007/s10854-021-06542-x>
- [2] Menezes, I. S., Silva, A. F., & Santos, J. B. (2019). Physical vapor deposition techniques for photovoltaic applications: Principles of CSVST. *Solar Energy Materials and Solar Cells*, 192, 123-130. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.12.015>.
- [3] Morales-Acevedo, A. (2019). Design of very thin CdTe solar cells with high efficiency. *Materials Science in Semiconductor Processing*, 103, 104620. <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2019.104620>
- [4] Zhu, H., Wang, L., & Shao, S. (2020). Stoichiometry control in II-VI semiconductor thin films grown by vapor phase transport. *Crystals*, 10(8), 654. <https://doi.org/10.3390/cryst10080654>
- [5] Hernández V. C. (2019). Análisis comparativo de los parámetros eléctricos característicos de una celda solar

## Caracterización estructural y óptica de películas ultradelgadas de ZnS como alternativa prometedora al CdS en celdas solares de CdTe

Paulina Díaz Leal Cortina<sup>1</sup>, María de Lourdes Albor Aguilera<sup>2</sup>, Massimo Bertino<sup>3</sup>, Christian Jiménez Campero<sup>4</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Politécnico Nacional-ESFM, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México*

<sup>2</sup>*instituto Politécnico Nacional-ESFM, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México*

<sup>3</sup>*Virginia Commonwealth University-Department of Physics, Honors College 701 W Grace Street  
Richmond, VA 23284-2041*

<sup>4</sup>*instituto Politécnico Nacional-ESFM, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México*

*Correo electrónico:*

*plealc1900@alumno.ipn.mx*

Las celdas solares de CdTe se encuentran entre las tecnologías fotovoltaicas de película delgada más relevantes para la generación de energía renovable. Sin embargo, el CdS continúa siendo la capa ventana más utilizada, a pesar de las preocupaciones asociadas con la presencia de cadmio en los dispositivos fotovoltaicos [1], [2]. Por ello, existe un interés creciente en el desarrollo de semiconductores de amplio band gap que permitan reducir el uso de CdS sin afectar las propiedades ópticas y electrónicas requeridas. El sulfuro de zinc (ZnS) ha despertado especial interés debido a su alta transparencia óptica, amplio band gap, baja toxicidad y compatibilidad con arquitecturas fotovoltaicas basadas en CdTe [3], [4]. Además, las películas delgadas de ZnS pueden obtenerse mediante rutas químicas de baja temperatura, lo que favorece procesos de fabricación con menor consumo energético y menor costo.

En este trabajo se sintetizaron películas ultradelgadas de ZnS (<100 nm) y se caracterizaron mediante técnicas morfológicas y ópticas. La morfología superficial y homogeneidad de las películas se evaluaron mediante microscopía electrónica de barrido (SEM), mientras que la espectroscopía UV-Vis se empleó para determinar la transmitancia óptica y estimar el band gap mediante el método de Tauc. El espesor fue determinado mediante perfilometría.

Las observaciones por SEM mostraron un recubrimiento homogéneo, mientras que las mediciones ópticas confirmaron la elevada transparencia característica de los semiconductores de amplio band gap. Los valores estimados de energía de banda prohibida resultaron adecuados para aplicaciones fotovoltaicas. Aunque la integración de ZnS en dispositivos completos aún se encuentra en estudio, los resultados sugieren que este material constituye una alternativa prometedora para disminuir el uso de CdS en celdas solares de CdTe y contribuir al desarrollo de tecnologías fotovoltaicas más sustentables [2], [4].

**Agradecimientos:** Paulina Díaz Leal Cortina agradecen al SECIHTI por la beca nacional otorgada. Trabajo financiado por el proyecto SIP20260189.

## Referencias

- [1] I. M. Dharmadasa y A. A. Ojo, “Unravelling complex nature of CdS/CdTe based thin film solar cells,” *J. Mater. Sci.: Mater. Electron.*, vol. 28, pp. 16598–16617, 2017.
- [2] J. Zhou et al., “CBD-Cd<sub>1-x</sub>Zn<sub>x</sub>S Thin Films and Their Application in CdTe Solar Cells,” *Phys. Status Solidi B*, vol. 241, no. 3, pp. 775–778, 2004.
- [3] K. Benyahia, A. Benhaya y M. S. Aida, “ZnS thin films deposition by thermal evaporation for photovoltaic applications,” *J. Semicond.*, vol. 36, no. 10, 2015.
- [4] M. N. E. Mahdi et al., “Effect of Chemical Bath Deposition Variables on the Properties of Zinc Sulfide Thin Films: A Review,” *Coatings*, vol. 13, no. 3, 2023.

## Electrical properties of PEDOT: PSS/CdTe junction

R.C. Ruiz Ortega<sup>1\*</sup>, M. L. Albor Aguilera<sup>2\*\*</sup>, M. A. González Trujillo<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Mexicano del Petróleo, Laboratorio de Termodinámica y Síntesis de Productos Químicos. Eje Central Lázaro Cárdenas Norte 152, 07730 México, CDMX*

<sup>2</sup>*Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México*

<sup>3</sup>*Instituto Politécnico Nacional-ESCOM, Formación Básica, U.P.A.L.M., San Pedro Zacatenco, CDMX, 07738, México*

Correo electrónico: \* [rcruiz@imp.mx](mailto:rcruiz@imp.mx) , \*\* [mlalbor@ipn.mx](mailto:mlalbor@ipn.mx)

Los polímeros conductores son materiales prometedores para aplicaciones en dispositivos optoelectrónicos debido a sus valiosas propiedades eléctricas, ópticas y magnéticas. Entre ellos, el poli(3,4-etilendioxitiofeno):poli(estireno sulfonato) (PEDOT:PSS) es uno de los polímeros conductores más estudiados, gracias a su alta transparencia óptica en la región visible del espectro, conductividad eléctrica, función de trabajo, así como a su gran flexibilidad y capacidad de deformación. Por estas características, se ha convertido en uno de los materiales más utilizados en la fabricación de dispositivos fotovoltaicos, pantallas, transistores y biosensores. En las celdas solares del tipo CdTe, la unión metal/semiconductor los principales problemas en la interfaz son la formación de barreras Schottky, la alta resistencia de contacto, la recombinación interfacial y la difusión de metales (especialmente Cu). Estas limitaciones afectan directamente el Voc, FF, Jsc y la estabilidad de la celda. Actualmente, gran parte de la investigación en celdas CdTe de alta eficiencia se enfoca en el diseño de contactos posteriores eficientes y el uso de regiones p+ que minimicen la recombinación y mejoren la estabilidad a largo plazo. El objetivo de este trabajo es incorporar una capa delgada de PEDOT:PSS como parte del contacto posterior. Las películas delgadas de PEDOT:PSS se depositaron sobre películas delgadas de CdTe mediante la técnica de recubrimiento por giro (spin-coating). Las propiedades físicas fueron estudiadas y analizadas , posteriormente los parámetros eléctricos de una celda solar del tipo FTO/CdS/CdTe/PEDOT:PSS/Cu/Au fueron determinadas.

**Palabras clave:** CdTe, PEDOT:PSS, contacto posterior, celdas solares.

**Agradecimientos:** Proyectos SIP20260189 y SIP20260328.

### Referencias:

[1] A. Jarkov a,\*, S. Bereznev a, K. Laes a, O. Volobujeva a, R. Traksmaa b, A. Öpik a, E. Mellikov “Conductive polymer PEDOT:PSS back contact for CdTe solar cell” january 2011, doi:10.1016/j.tsf.2010.12.230

[2] Weining Wang, Naba Raj Paudel, Yanfa Yan, Fernanda Duarte, Michael Mount “PEDOT:PSS as Back Contact for CdTe Solar Cells and the Effect of PEDOT:PSS Donductivity on Device Performance” *journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 27, 1057–1061. <https://doi.org/10.1007/s10854-015-3850-1>.

[3] W. Wang, B. Myers, Tyler Lucas, Brandon Barnes, N. Paudel, Yanfa Yan “The Effect of PEDOT:PSS Back Contact on CdTe/polymer Solar Cells” Published 16 March 2017 Physics, Materials Science, Engineering.

[4] Lin Hu, Jiaying Song, Xinxing Yin, Zhen Su and Zaifang Li \* “Research Progress on Polymer Solar Cells Based on PEDOT:PSS Electrodes” Received: 17 November 2019; Accepted: 17 December 2019; Published: 7 January doi:10.3390/polym1201014.

[5] Rosa Reyes-Molina, Julio C. Carrillo-Sendejas a b b , Svetlana Mansurova, Ismael Cosme a, \* “Effect of PEDOT:PSS optical properties at the frontal interface on electrical performance in MAPbI<sub>3</sub> perovskite solar cells”; Accepted 28 March 2024 Available online 5 April 2024, <https://doi.org/10.1016/j.optmat.2024.115299>

## Estudio teórico sobre celdas solares de SnSSe con la incorporación de superredes

E. Roblero-Castañón<sup>1</sup>, I. Montoya De Los Santos<sup>2</sup>, Maykel Courel<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Centro Universitario de los Valles. Universidad de Guadalajara, Carretera Guadalajara-Ameca Km. 45.5 C.p. 46600 Ameca, Jalisco, México.*

<sup>2</sup>*Instituto de Estudios de la Energía, Universidad del Istmo, Oaxaca C.P. 70760, Santo Domingo Tehuantepec, México.*

En el presente trabajo, se realizó una investigación del efecto túnel en el material SnSSe como celda solar mediante la implementación de superredes bajo condiciones ideales del límite radiativo, con y sin campo eléctrico. Debido a las características y propiedades similares de los materiales SnSe y SnS, con bandas prohibidas alrededor de 1.0 eV a 1.3 eV, es posible aprovechar la relación composicional S/Se, ajustando las propiedades finales de la celda solar SnS<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub>. Inicialmente, se analizó la incorporación de superredes sin campo eléctrico, variando los anchos de pozo y barrera, el número de pozos y la relación composicional S/Se. El siguiente paso fue incorporar superredes bajo un campo eléctrico, donde se analizaron diversos parámetros, incluyendo los anchos de pozo y barrera, el número de pozos y la relación composicional S/Se. Estos resultados se compararon con los obtenidos sin campo eléctrico para establecer una relación entre ambos casos. Se demostró que, para un pozo de 1 nm y una barrera de 1 nm, puede lograrse el efecto túnel, permitiendo la formación de grupos de aproximadamente 80 pozos. Los resultados de las superredes mostraron un aumento en la eficiencia hasta alrededor del 33%, en comparación con la eficiencia del material en bulto de 28.86% bajo condiciones ideales.

**Palabras claves:** Celda solar SnS<sub>1-x</sub>Se<sub>x</sub>, superredes, análisis teórico.

## **Evaluación de la eficiencia de una celda solar de perovskita $\text{MAPb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ con pozos cuánticos bajo el límite radiativo mediante simulación numérica**

Daniel A. Uribe-Colima, Maykel Courel

Centro Universitario de los Valles. Universidad de Guadalajara, Carretera Guadalajara-Ameca km. 45.5, C. P. 46600, Ameca, Jalisco, México.

En este trabajo, se realizó un estudio teórico sobre una celda solar de perovskita de haluro mixto basada en  $\text{MAPb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$  bajo el límite radiativo. En primera instancia, se examinó el comportamiento de la celda solar del material en bulto, variando la relación composicional ( $\text{Br}/(\text{I}+\text{Br})$ ) y el espesor del material absorbedor, considerando las características de las perovskitas  $\text{MAPbI}_3$  y  $\text{MAPbBr}_3$  con bandas prohibidas de 1.55 eV y 2.3 eV, respectivamente, estableciendo un espesor óptimo de 3  $\mu\text{m}$ . Posteriormente, al implementar estructuras de pozos cuánticos, se evaluó el impacto de diversos parámetros, los cuales incluyen la variación en la relación composicional en la barrera y el pozo, el ancho de pozo y el número de pozos en el rendimiento de la celda solar. Los resultados obtenidos bajo la implementación de estas nanoestructuras, muestran aumentos en la eficiencia al variar la geometría de los pozos, logrando alcanzar hasta una eficiencia de alrededor del 40%, en comparación con la eficiencia del material en bulto de 28.55% para un espesor de 3  $\mu\text{m}$  bajo condiciones ideales.

**Palabras claves:** Celda solar,  $\text{MAPb}(\text{I}_{1-x}\text{Br}_x)_3$ , pozos cuánticos, eficiencia, límite radiativo

## Comparative Analysis of Organic and Inorganic HTLs for Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> Solar Cells: A SCAPS-1D Study

Farhan Yousaf<sup>1</sup>, Maykel Courel Piedrahita<sup>2</sup>, María de Lourdes Albor Aguilera<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Politécnico Nacional - IPN, Physics, Mexico.*

<sup>2</sup>*CUValles, Universidad de Guadalajara, Mexico.*

Correo electrónico: fyousaf2400@alumno.ipn.mx

This study presents a comprehensive numerical investigation of hole transport layers (HTLs) in ITO/CdS/Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>/HTL/Au thin-film solar cells using the SCAPS-1D simulation tool. Three HTL materials, Spiro-OMeTAD, PEDOT:PSS, and CuO, were systematically analyzed following model validation against experimental J-V and EQE characteristics. Baseline simulations yielded power conversion efficiencies of 10.53%, 9.27%, and 10.33% for Spiro-OMeTAD, PEDOT:PSS, and CuO, respectively. Further optimization of key parameters, including bandgap, electron affinity, layer thickness, hole mobility, and acceptor concentration, was carried out to enhance device performance. After optimization, efficiencies of approximately 10.57% were achieved for both Spiro-OMeTAD and CuO, while PEDOT:PSS reached 10.56%. The results indicate that optimized inorganic CuO can rival Spiro-OMeTAD not only in terms of efficiency (around 10.6%) but also with advantages in stability and cost-effectiveness. This work provides a design framework for HTL engineering in Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub>-based solar cells, effectively bridging the gap between numerical simulation and experimental implementation [1].

**Agradecimientos:** SIP project number 20260189

[1] Yousaf, F., Albor-Aguilera, M. L., & Courel, M. (2026). Numerical insights into the role of organic and inorganic hole transport layers in Sb<sub>2</sub>Se<sub>3</sub> thin-film solar cells. *MRS Advances*, 11(3), 254-261.

## Estudio morfológico de películas delgadas de CdSe depositadas en área grande

Guillermo Leonardo Vidal-Martínez<sup>1\*</sup>, María de Lourdes Albor-Aguilera<sup>1\*\*</sup>,  
César Hernandez-Vasquez<sup>2</sup>, Miguel Angel González Trujillo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Politécnico Nacional-ESFM, Depto. de Física, U.P.A.L.M, San Pedro Zacatenco, 07738  
CDMX, México*

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

Correo electrónico: [\\*gvidalm1400@alumno.ipn.mx](mailto:*gvidalm1400@alumno.ipn.mx) , [\\*\\*mlalbora@ipn.mx](mailto:**mlalbora@ipn.mx)

Las celdas solares basadas en CdTe han experimentado avances significativos en los últimos años gracias a la incorporación de materiales semiconductores como el CdSe, el cual favorece una conversión más eficiente de la energía solar debido a sus adecuadas propiedades optoelectrónicas, estabilidad química y elevada movilidad de portadores de carga. Diversos estudios han demostrado que la integración de CdSe en estas estructuras contribuye a mejorar las propiedades eléctricas del dispositivo y, en consecuencia, su eficiencia de conversión fotovoltaica.

Uno de los principales desafíos en la obtención de películas delgadas de CdSe consiste en controlar sus propiedades morfológicas y estructurales, ya que estas influyen directamente en el desempeño del dispositivo. En este contexto, el área del sustrato desempeña un papel importante en los mecanismos de crecimiento y en la calidad final de la película depositada.

En este trabajo se presentan los resultados de la caracterización morfológica, estructural y óptica de películas delgadas de CdSe depositadas sobre sustratos de SnO<sub>2</sub>:F (FTO) en diferentes áreas mediante la técnica de transporte de vapor en espacio cerrado (CSVT, por sus siglas en inglés, Closed Space Vapor Transport). Las películas fueron analizadas mediante espectroscopía UV-Vis, difracción de rayos X y microscopía de fuerza atómica. Los resultados revelan la formación de una fase cristalina con estructura hexagonal y una energía de banda prohibida de aproximadamente 1.7 eV. Estos hallazgos aportan información relevante para la optimización de películas de CdSe y su aplicación en dispositivos fotovoltaicos avanzados basados en heteroestructuras del tipo CdTe/CdSe.

**Palabras clave:** CdSe, celdas solares, propiedades morfológicas.

**Agradecimientos:** Este trabajo fue apoyado por los proyectos SIP 20260328 y SIP 20260189, alumno con beca SECIHTI y BEIFI

## Referencias:

- [1] Baines, T., Zoppi, G., Bowen, L., Shalvey, T. P., Mariotti, S., Durose, K., & Major, J. D. (2018). Incorporation of CdSe layers into CdTe thin film solar cells. *Solar Energy Materials And Solar Cells*, 180, 196-204. <https://doi.org/10.1016/j.solmat.2018.03.010>
- [2] Khomane, A. (2010). Structural, morphological and optical properties of nanocrystalline cadmium selenide thin films. *Journal Of Alloys And Compounds*, 506(2), 849-852. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2010.07.092>
- [3] Dutta, R. P., & Neog, N. (2021). An investigation of CdSe thin film for photovoltaic properties under different annealing temperatures. *Materials Today Proceedings*, 42, 893-896. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.11.739>
- [4] Choudhary, R., & Chauhan, R. P. (2019). Thickness depends on structural, optical and electrical properties of CdSe thin films. *Journal Of Materials Science Materials In Electronics*, 30(6), 5753-5759. <https://doi.org/10.1007/s10854-019-00870-8>

## **Ag<sub>3</sub>SbS<sub>3</sub> Thin Films Prepared by Electrodeposition for Photoelectrochemical Cell Applications: Structural, Morphological, and Optical Properties**

R.G. Avilez García<sup>1</sup>, T.G Gonzalez<sup>1</sup>, R.G.Sotelo Marquina<sup>2</sup>, X. Mathew<sup>1</sup>, N.R Mathew<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>*Universidad Popular de Chontalpa, Cárdenas, Tabasco, 85597, Mexico.*

\* Corresponding author: - N.R Mathews: [nrm@ier.unam.mx](mailto:nrm@ier.unam.mx)

The Ag<sub>3</sub>SbS<sub>3</sub> is a p-type semiconductor that present suitable optical properties, such as low band gap between 1.62-1.7 eV, high absorption coefficient (10<sup>5</sup> cm<sup>-1</sup>).[1] [2]In this work, we present. The electrodeposition of Ag<sub>3</sub>SbS<sub>3</sub> thin films by potentiostatic method. The structural, morphological, optical and photoelectrochemical (PEC) properties were analyzed. An Ag/Sb precursor ratio of 0.64 was employed for the synthesis of stoichiometric Ag<sub>3</sub>SbS<sub>3</sub> thin films. The electrodeposition process was performed at a constant potential of -0.77 V versus the saturated calomel electrode (SCE). Films with a thickness of approximately 900 nm were obtained after 50 minutes of deposition. The optical band gap calculated was 1.65 eV. The heat treatment temperature was systematically varied from 300 to 450 °C, revealing that the pure Ag<sub>3</sub>SbS<sub>3</sub> phase forms at 400 °C. The annealing conditions were optimized resulting in a homogeneous compact thin film. Chemical composition analysis yielded Sb = 14.9%, S = 42.2%, and Ag = 42.5%, consistent with literature-reported values. Raman spectroscopy confirmed the phase identity, with vibrational modes observed at 329, 277, 249, 208, 188, and 174 cm<sup>-1</sup>, all characteristic of Ag<sub>3</sub>SbS<sub>3</sub>.

Acknowledgements: This work was done in IER-UNAM and was supported by the projects (PAPIIT: IN111824, 109324, y LYFICS-LN321194.). Authors thank Maria Luisa Ramon Garcia for the XRD measurements.

[1] U. Chalapathi *et al.*, “Development of pyrargyrite Ag<sub>3</sub>SbS<sub>3</sub> absorber films through sulfurization of Ag–Sb stacks for thin-film photovoltaics,” *Solid State Sci*, vol. 153, Jul. 2024, doi: 10.1016/j.solidstatesciences.2024.107560.

[2] U. Chalapathi *et al.*, “Impact of stacking sequence and sulfurization duration on the growth of pyrargyrite Ag<sub>3</sub>SbS<sub>3</sub> absorber layers,” *J Solid State Chem*, vol. 338, Oct. 2024, doi: 10.1016/j.jssc.2024.124832.

## RESÚMENES DE PRESENTACIONES – SESIÓN DE CÁLCULOS DE PRIMEROS PRINCIPIOS.

### Interacciones débiles y fuertes en clatratos y superficies metálicas

Ramón Hernández Lamonedá<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Centro de Investigaciones Químicas, IICBA, UAEM.*

Correo electrónico: ramon@uaem.mx

En esta charla abordaré dos problemas de fuerzas intermoleculares en estado sólido de interés en ciencia básica y posibles **aplicaciones. El primero concierne a los clatratos de halógenos, en particular el caso del cloro, que se conoce** desde los tiempos de Davy y Faraday. Más recientemente [1,2] el grupo de Ripmeester realizó un estudio detallado de la estructura y dinámica de rotación usando rayos X. Presentaré los análisis teórico-computacionales que hemos realizado[3,4] para interpretar y predecir distintas propiedades, en particular la presencia de enlaces de halógeno. En la segunda parte presentaré un estudio de la reactividad del acrilato de metilo (AM) sobre la superficie de Cu(111). Este estudio [5] fue motivado por el interés en los biocombustibles y los procesos de corrosión en motores debido a moléculas como el AM. Hemos caracterizado distintas configuraciones de quimisorción y los mecanismos de reacción para diversos procesos que también se han estudiado en fase gas, contrastaremos ambos casos en particular la reacción de disociación en tres cuerpos.

- [1] Udachin, K., Alavi, S., Ripmeester, J.A., Water-halogen interactions in chlorine and bromine clathrates: an example of multidirectional bonding, *J. Phys. Chem. C* **117**, 14176, 2013.
- [2] Dureckova, H., Woo, T., Alavi, S., Molecular simulations and density functional theory calculations of bromine in clathrate hydrate phases, *J. Chem. Phys.* **144**, 044501, 2016.
- [3] Cuautli, C., Hernández-Lamonedá, R., Halogen bonding and cooperative effects in chlorine clathrate: Ab initio periodic study, *J. Phys. Chem. C* **123**, 24793, 2019.
- [4] Ochoa-Resendiz, D., Gamboa-Suárez, A., Hernández-Lamonedá, R., Halogen bonding and rotational disorder in chlorine clathrate hydrate cages, *J. Chem. Phys.* **156**, 124302, 2022.
- [5] Ghafour El Hachimi, A., Ochoa-Resendiz, D., Quinto-Hernández, A., Hernández-Lamonedá, R., Computational study of the dissociation reactions of methyl acrylate on the Cu (111) surface, *submitted to J. Phys. Chem. C*, 2026.

## Sitios de átomos individuales sobre óxido de siliceno: hacia una comprensión de su estabilidad térmica

Andrés Álvarez-García<sup>1</sup>, Roxana Miztayé del Castillo Vázquez<sup>1</sup>, José Eduardo González<sup>1</sup>, Raúl Arturo Espejel-Morales<sup>1</sup>, Alipio Gustavo Calles<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, CDMX 04510, México.*

Correo electrónico: afagarcia@ciencias.unam.mx

La dispersión de los átomos metálicos sobre óxidos se ha utilizado para optimizar el aprovechamiento de los metales preciosos y preservar su actividad catalítica. En el caso del siliceno, su proceso de oxidación es muy exotérmico con una barrera de energía casi nula [1-2]. En particular, el óxido de Si<sub>2</sub>O<sub>2</sub> se mantiene estable ante la reconstrucción, la fractura y la transformación de fase en simulaciones NVT a 300 K, en comparación con otras especies oxidadas [3]. Aunque la reactividad del Si<sub>2</sub>O<sub>2</sub> es baja debido a la pasivación por oxígeno, la adsorción de átomos individuales en este soporte puede presentar propiedades fisicoquímicas significativas. En este trabajo, adsorbimos átomos de Ni, Pd, Cu y Ag sobre Si<sub>2</sub>O<sub>2</sub> y evaluamos su estabilidad térmica. El análisis de la estructura electrónica revela que el Ni presenta la interacción más fuerte con el soporte, impulsada por la hibridación entre los estados del Ni (d) y los del O (p) en del rango de los niveles de Fermi. Las simulaciones AIMD a 300 y 600 K confirman que tanto el Ni como el Cu mantienen su anclaje a la superficie, mientras que el Pd y el Ag presentan eventos de migración. También evaluamos el impacto de las interacciones metal-adsorbato en la estabilidad de los sitios de átomos individuales [4]. Mientras que los sitios de Ni y Cu permanecen estables bajo adsorción molecular a 300 K, elevar la temperatura a 600 K desencadena una migración asistida por el adsorbato. Estos resultados aportan información sobre la estabilidad térmica y la actividad catalítica de los SAC en aplicaciones a temperatura finita.

### Agradecimientos

AAG agradece a la Dirección General de Asuntos del Personal Académico (DGAPA) por el Programa de Becas Posdoctorales de la UNAM. Agradezco a la DGAPA-UNAM-PAPIIT, por el apoyo mediante el proyecto IN109124 y a la DGTIC-UNAM por los proyectos LANCAD-UNAM-DGTIC-385 y LANCAD-UNAM-DGTIC-055 que permitieron la realización de este trabajo.

- [1] Wang, R.; Pi, X.; Ni, Z.; Liu, Y.; Lin, S.; Xu, M.; Yang, D. Silicene oxides: Formation, structures and electronic properties. *Scientific Reports*, 3 (2013)
- [2] Gonzalez-Rodriguez, R.; del Castillo, R. M.; Hathaway, E.; Lin, Y.; Coffey, J. L.; Cui, J. Silicene/Silicene Oxide Nanosheets for Broadband Photodetectors. *ACS Applied Nano Materials* 5, 4325–4335, (2022)
- [3] Liu, Y.; Liang, T.; Li, Y.; Zhao, Y.; Guo, Z.; Ma, F.; Dai, Z. Silicene oxide: a potential Battery500 cathode for sealed non-aqueous lithium–oxygen batteries. *Materials Today Energy* 18, 100503 (2020)
- [4] Humphrey, N.; Bac, S.; Mallikarjun Sharada, S. Adsorbate-assisted migration of the metal atom in atomically dispersed catalysts: An ab initio molecular dynamics study. *The Journal of Chemical Physics*, 154, 234709 (2021)

## **Cucurbiturilos como acarreadores de fármacos en quimioterapia: un estudio mediante inteligencia artificial y teoría del funcional de la densidad**

Marian Valentina Vilchis Alcantara<sup>1</sup>, Fernando Buendia Zamudio<sup>2</sup>, Angélica María Fierro Huerta<sup>3</sup>,  
Margarita Elly Aliaga Miranda<sup>3</sup>, Alan Miralrio<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Tecnológico de Monterrey*

<sup>2</sup>*National University of Singapore*

<sup>3</sup>*Pontificia Universidad Católica de Chile*

Correo electrónico: miralrio@tec.mx

El cáncer de mama es el tipo de cáncer más diagnosticado y la segunda causa de mortalidad por cáncer en mujeres. Si bien la detección y el tratamiento tempranos pueden conducir a una recuperación completa, la quimioterapia suele causar efectos secundarios perjudiciales. Los nanomateriales han demostrado tener aplicaciones potenciales en la administración de fármacos, con nano acarreadores diseñados para actuar en sitios específicos y controlar la dosis de sustancias, mitigando así los efectos de la sobredosis. Los cucurbiturilos son una familia de moléculas macrocíclicas conocidas por su estructura altamente simétrica en forma de toroidal, lo que les permite formar complejos con una variedad de moléculas. Estas se utilizan comúnmente en química supramolecular, reconocimiento molecular y administración de fármacos debido a su fuerte capacidad para encapsular compuestos orgánicos. Este trabajo propone un estudio, mediante teoría del funcional de la densidad, del Cucurbit[7]urilo (CB7) encapsulando más de 30 de fármacos de quimioterapia distintos. La investigación involucró la teoría ácido-base dura-blanda de Pearson como descriptores modelos de relación cuantitativa estructura-propiedad (QSPR) comunes para construir modelos predictivos de la energía de enlace entre el CB7 y el fármaco. Los descriptores se calcularon utilizando el funcional PBE y la base def2-TZVP con correcciones de dispersión D4. Los modelos predictivos QSPR, se desarrollaron mediante regresión lineal múltiple e inteligencia artificial (IA) de IBM Watson

## **Estudio ab initio de las propiedades ópticas de la superficie de Ti [0001] con un recubrimiento de carbono y una capa de grafeno altamente decorado con Ti**

A. Zárate<sup>3</sup>, O. Salas<sup>3</sup>, Mónica Canales<sup>2</sup>, L. F. Magaña<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México, CDMX, México.*

<sup>2</sup>*Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, CDMX, México.*

<sup>3</sup>*Escuela Superior de Ingeniería Mecánica y Eléctrica Zacatenco, Instituto Politécnico Nacional, CDMX, México.*

Correo electrónico: fernando@fisica.unam.mx

En este trabajo se presentan los resultados del estudio de primeros principios de las propiedades ópticas de dos sistemas de gran interés tecnológico: la superficie de titanio [0001] enmascarada con una monocapa de carbono y una capa de grafeno altamente decorada con titanio. Se utilizó la teoría del funcional de densidad (DFT) y la dinámica molecular (DM) bajo condiciones de presión atmosférica y 300 K, utilizando el código Quantum Espresso bajo la aproximación de gradiente generalizado (GGA), se optimizaron las geometrías de ambos sistemas y se calculó el tensor dieléctrico dentro de la aproximación de fase aleatoria (RPA) para determinar los espectros de absorción óptica y reflectividad normal. Los resultados muestran modificaciones drásticas en la respuesta óptica respecto a los materiales puros: la adición de la capa de carbono sobre el Ti elimina el pico de absorción de alta energía (~35 eV) y simplifica el espectro a un único máximo a ~4 eV. Por otro lado, la cobertura de Ti sobre el grafeno induce la aparición de tres nuevos picos de absorción en las regiones del infrarrojo, visible y ultravioleta profundo (~2 eV, ~5 eV y ~33 eV), rompiendo la transparencia óptica característica del grafeno prístino [1].

### **Agradecimientos**

Agradecemos a la Dirección General de Asuntos del Personal Académico de la Universidad Nacional Autónoma de México (DGAPA-UNAM) por el apoyo parcial mediante el proyecto PAPIIT IN113220, y al Centro de Supercómputo UNAM-Miztli por la asistencia técnica dentro del proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-030.

[1] A. Zárate, O. Salas, M. Canales, L. F. Magaña, *Journal of Physics: Conference Series* 1723, 012055 (2021).

# Engineering MAPbI<sub>3</sub> Perovskites by Sn/Ge and Cl/Br Co-Doping: Insights from First-Principles Calculations

K. Ouassoul<sup>1</sup>, T. E. Soto<sup>1</sup>, B. Aguilar<sup>1</sup>, O. Navarro<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Unidad Morelia del Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México, Antigua Carretera a Pátzcuaro No. 8701, Morelia, Michoacán, México.*

Correo electrónico: ouassoulkhaoula@materiales.unam.mx

Hybrid organic–inorganic perovskites are promising materials for photovoltaic applications due to their tunable structural and optoelectronic properties. In this work, first-principles DFT calculations were performed using Quantum ESPRESSO to investigate the effect of Sn/Ge and Cl/Br co-doping on MAPbI<sub>3</sub> perovskites. The studied systems are described as MAPb<sub>0.75</sub>M<sub>0.25</sub>I<sub>2.5</sub>X<sub>0.5</sub>, where M = Sn or Ge and X = Cl or Br. Structural stability was evaluated through the Goldschmidt tolerance factor, Li's octahedral factor, formation energy, volume variation, and octahedral distortion. The results confirm that all doped compounds preserve a stable perovskite-compatible structure, with negative formation energies indicating favorable substitution. The optical analysis shows that Sn-based co-doping, particularly Sn–Cl and Sn–Br, enhances the optical response compared with pristine MAPbI<sub>3</sub>. These findings suggest that Sn/halide co-doping is an effective strategy to improve the stability and photovoltaic performance of MAPbI<sub>3</sub>-based absorbers.

## Agradecimientos

Khaoula Ouassoul acknowledges SECIHTI by the Consolidation Posdoctoral Scholarships 10604005. T. E. Soto thanks project UNAM-DGAPA-PAPIIT IA102026. The authors gratefully acknowledge the Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS), part of the CONACYT National Laboratories network, for providing the high-performance computing resources used in this study under project No. 202601012N.

## **Modelado DFT de híbridos Ho(III) nanopuntos de carbono: transferencia de carga y detección fluorescente de oxalato**

Jonathan Siu Loong Robles Hernández<sup>1</sup>, Ivan Humberto Hernández Sánchez<sup>2</sup>, Alfredo Jiménez-Mondragón<sup>2</sup>, Ana María Soto-Estrada<sup>2</sup>, Alan Miralrio<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Monterrey 64849, México.*

<sup>2</sup>*Departamento de Química, Universidad Autónoma Metropolitana, Ciudad de México 09310, México.*

Correo electrónico: A01754992@tec.mx

Se realizó un estudio basado en la teoría de funcionales de la densidad para esclarecer el mecanismo electrónico asociado con la respuesta fluorescente de híbridos de holmio(III) (Ho(III)) con nanopuntos de carbono empleados en la detección de oxalatos. Se utilizaron modelos basados en fullerenos C<sub>60</sub>, funcionalizados con grupos que contienen oxígeno, como aproximaciones moleculares de la superficie de los nanopuntos de carbono. Se realizó la optimización mediante teoría del funcional de la densidad (DFT) usando como funcional mediante los métodos B3LYP/def2-TZVP para el Ho<sup>3+</sup> y B3LYP/6-31G para los otros átomos. La interacción con Ho<sup>3+</sup> se analizó mediante geometrías optimizadas, orbitales de frontera, mapas de potencial electrostático, cargas de Mulliken e Hirshfeld y la teoría cuántica de átomos en moléculas de Bader. Los resultados muestran que Ho<sup>3+</sup> se coordina preferentemente con grupos funcionales oxigenados, formando interacciones Ho–O predominantemente iónicas. Los análisis de carga confirman una transferencia electrónica desde los modelos de nanopuntos de carbono hacia Ho<sup>3+</sup>, lo cual sustenta la formación del híbrido Ho<sup>3+</sup>–CNDs responsable del apagamiento de fluorescencia. En contraste, el complejo del holmio con los oxalatos presenta mayor estabilidad electrónica, explicando el desplazamiento de Ho<sup>3+</sup> desde la superficie de los nanopuntos de carbono y la subsecuente recuperación de fluorescencia. Estos resultados proporcionan una explicación molecular del mecanismo de detección turn-off/on [1].

[1] [1] Jonathan-Siu-Loong Robles-Hernández, Ivan Humberto Hernández Sánchez, Alfredo JiménezMondragón, Ana María Soto-Estrada, and Alan Miralrio *ACS Omega* **2025** 10 (34), 38799-38813. DOI: 10.1021/acsomega.5c04086

## **Efectos de la estequiometría en superficies $W_xC_y$ al adsorber NO utilizando cálculos de primeros principios**

Luis Fernando Magaña Solís<sup>1</sup>, Mariana Esther Torres Revuelta<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Estado Sólido, Instituto de Física, UNAM, Ciudad de México, México*  
Correo electrónico: fernando@fisica.unam.mx, marianatorres@estudiantes.fisica.unam.mx

El carburo de tungsteno se ha estudiado ampliamente en su estequiometría 2:1 (tungsteno:carbono) debido a su notable resistencia mecánica y química en entornos húmedos y corrosivos. No obstante, su interacción con especies gaseosas reactivas sigue siendo un campo de estudio sin resolver. En este trabajo se investiga la adsorción de óxido nítrico (NO), un contaminante de relevancia ambiental e industrial, sobre superficies de carburo de tungsteno mediante cálculos de primeros principios basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT), tal y como se implementa en el paquete Quantum ESPRESSO. Como primera aproximación, se emplearon la función de intercambio-correlación de Perdew–Burke–Ernzerhof (PBE) dentro de la aproximación de gradiente generalizado (GGA). Se modelaron superficies de carburo de tungsteno prístinas con estequiometrías de tungsteno-carbono de 1:1, 2:1 y 1:2, y se evaluaron sus configuraciones de adsorción más estables. Los resultados preliminares indican que el extremo menos electronegativo de la molécula de NO muestra una mayor afinidad por los sitios de la red superficial, independientemente de si intervienen átomos de tungsteno o de carbono. Las energías de adsorción calculadas para las configuraciones más estables son de  $-2.15$  eV,  $-2.81$  eV y  $-1.11$  eV para las superficies  $W_xC_y$  analizadas, lo que revela una dependencia significativa de la fuerza de adsorción dependiendo de la especie atómica de la superficie. Entre los trabajos en curso se incluye la caracterización de su respuesta óptica. Estos resultados contribuyen a comprender los materiales a base de carburo de tungsteno como posibles candidatos para la captura, detección y transformación de gases contaminantes generados en procesos industriales

### **Agradecimientos**

Agradecemos al Departamento de Supercómputo de la Dirección General de Cómputo y de Tecnologías de Información y Comunicación por los recursos otorgados para el proyecto LANCAD-UNA,-DGTIC-030

## Respuesta SERS en cúmulos de Cu, Ag y Au con Py: el potencial de los sistemas bimetálicos Ag-Cu

Halis Y. Seuret<sup>1,2</sup>, Cercis Morera Boado<sup>3</sup>

<sup>1</sup>PrepaTec Campus Cuernavaca, Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey

<sup>2</sup>Centro de Investigaciones Químicas, IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, 62209, Morelos, México.

Departamento de Físicoquímica Teórica, Secihti-Centro de Investigaciones Químicas, IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, 62209, Morelos, México.

La Espectroscopia Raman de superficie exacerbada (SERS) amplifica la señal Raman cuando una molécula interactúa con una NP metálica, permitiendo la detección de moléculas a nivel individual. Esto ofrece ventajas en sensores y análisis molecular. En este proyecto se estudió teóricamente la respuesta SERS de cúmulos de 20 átomos de Cu, Ag y Au con diferentes simetrías y composiciones (monometálicos y bimetálicos), enlazados a piridina (Py) en dos posiciones: vértice y superficie. Se utilizaron la DFT y su versión dependiente del tiempo. Primero, se validaron energías de interacción y espectros UV-Vis de los dímeros  $M_2$ -Py y MN-Py (M,N=Cu,Ag,Au) con referencia CCSD(T) y EOM-CCSD. Los funcionales GGA y  $\omega$ B97X-D reproducen correctamente parámetros estructurales y energéticos, mientras que PBE0, HSE06, LC- $\omega$ PBE y CAM-B3LYP son recomendados para energías de excitación. La respuesta SERS estática estuvo modulada por distancias de enlace, energías de adsorción, polarizabilidad del enlace, polarizabilidad de modos vibracionales específicos y densidad electrónica. En espectros Raman estáticos y resonantes, los modos normales  $\nu_{8a}$ ,  $\nu_{11}$  y  $\nu_{9a}$  mostraron clara diferencia entre las posiciones vértice y superficie, identificando el mecanismo resonante predominante. Los cúmulos bimetálicos de Ag presentaron un aumento significativo en la intensidad de la señal SERS, lo que sugiere que la incorporación de átomos de Cu podría mejorar considerablemente el rendimiento de SERS en Ag<sub>20</sub>Td. El factor de mejoramiento de la señal ( $EF_{int}$ ) siguió la siguiente tendencia: Cu-Py-V > Ag-Py-V > Cu-Py-S > Ag-Py-S. Este resultado subraya el gran potencial de los cúmulos bimetálicos Cu-Ag para su uso en SERS

## RESÚMENES DE PRESENTACIONES – SESIÓN DE FÍSICA MATEMÁTICA

### **Fractional Driven Damped Oscillator: Solution and Forced Response Analysis.**

Fernando Olivar Romero

*Departamento de Ciencias. Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México.*

This work presents an exact analytical solution for the fractional driven damped oscillator equation formulated in terms of Caputo fractional derivatives of order  $\alpha$ , with  $1/2 < \alpha < 1$ . The model describes the dynamics of a damped oscillatory system subjected to an arbitrary external driving force and extends the classical forced damped oscillator by incorporating memory effects through fractional time derivatives. Using Laplace-transform techniques and contour integration, the solution is expressed as the sum of the homogeneous response and two forced-response contributions, one associated with branch-cut effects and another determined by the poles of the Laplace transform of the driving function. This general representation provides the response of the fractional damped oscillator to a broad class of external forces. As a particular case, a sinusoidal driving force proportional to  $\sin(\omega t)$  is analyzed in detail, yielding explicit expressions for the amplitude, phase shift, and resonance frequency. The results show how the fractional order and the damping parameter modify the transient behavior, the steady oscillatory response, and the resonance profile of the system, recovering the classical damped oscillator in the appropriate limiting case

## **Control de inundaciones urbanas mediante válvulas Tesla: Un modelo de parámetros concentrados**

Mario Iván Estrada Delgado

*Departamento de Ciencias. Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México.*

En este trabajo se propone un modelo dinámico de parámetros concentrados para la mitigación de inundaciones urbanas mediante elementos de almacenamiento inspirados en válvulas Tesla. El sistema urbano se representa como una red de nodos conectados, en la que el intercambio de agua entre calles se determina por la topografía local y se describe mediante ecuaciones diferenciales acopladas. Los elementos de almacenamiento actúan como reservorios temporales que capturan parte del caudal entrante y lo liberan gradualmente, modificando la respuesta hidrológica de la red. Las simulaciones numéricas muestran que este mecanismo reduce la altura máxima del agua aguas abajo y retrasa el tiempo al pico, lo que favorece el drenaje del sistema y disminuye la intensidad de la inundación en la región bajo estudio.

## Towards Disease Eradication: Long-Term Control with Constant Vaccination Rates in the Normalized SIR Model

Jorge Antonio Becerril Gómez

*Departamento de Ciencias. Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México.*

[jorge.becerril@tec.mx](mailto:jorge.becerril@tec.mx)

**Abstract:** La vacunación continúa siendo una de las herramientas más efectivas para el control de enfermedades infecciosas, pero determinar el nivel de esfuerzo necesario para alcanzar la erradicación sigue siendo un problema de gran interés. En esta charla se presentará un estudio basado en un modelo epidemiológico SIR normalizado que incorpora nacimientos, muertes naturales, mortalidad inducida por la enfermedad y una estrategia de vacunación aplicada a una fracción constante de la población susceptible.

Se mostrará cómo el análisis dinámico del modelo permite identificar un umbral crítico de vacunación que separa dos regímenes de comportamiento: uno en el que la enfermedad persiste de manera endémica y otro en el que la proporción de individuos infectados converge asintóticamente a cero. Este resultado proporciona una interpretación clara del esfuerzo mínimo de vacunación requerido para perseguir la erradicación de la enfermedad.

Además, se discutirá una estrategia de control en dos etapas que combina técnicas de control óptimo para acelerar la reducción de la infección con una política de vacunación constante para mantener el sistema en una trayectoria hacia la erradicación. Aunque el estudio se desarrolla con parámetros genéricos y no se enfoca en una enfermedad específica, los resultados ofrecen información útil para comprender los mecanismos que determinan el éxito de campañas de vacunación sostenidas y para el diseño de políticas de control epidemiológico de largo plazo.

## **Modelación de la velocidad y resiliencia del tráfico en intersecciones bajo condiciones de accidente mediante autómatas celulares**

*R. Marzoug<sup>1</sup>, N. Lakouari<sup>2</sup>, G.A. Mejía Pérez<sup>3</sup>, B. Castillo Téllez<sup>4</sup>, M. Castillo Téllez<sup>5</sup>*

<sup>1</sup> *Centro Universitario del Norte, Universidad de Guadalajara, Colotlán, Jalisco.*

<sup>2</sup> *Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica, Puebla, Puebla.*

<sup>3</sup> *Centro Universitario del Tlaquepaque, Universidad de Guadalajara, Tlaquepaque, Jalisco.*

<sup>4</sup> *Centro Universitario del Tonalá, Universidad de Guadalajara, Tonalá, Jalisco.*

<sup>5</sup> *Facultad de ingeniería, Universidad Autónoma de Campeche, Campeche.*

Correo electrónico: [rachid.marzoug@academicos.udg.mx](mailto:rachid.marzoug@academicos.udg.mx)

El presente estudio investiga la evolución temporal de la velocidad del tráfico durante accidentes en intersecciones utilizando un modelo de autómatas celulares (CA). Los resultados de la simulación revelan un comportamiento de resiliencia no lineal caracterizado por tres regiones distintas: alta resiliencia ante una baja probabilidad de entrada  $\alpha$ , un mínimo pronunciado en niveles intermedios de  $\alpha$ , y una recuperación parcial con niveles altos de  $\alpha$ . La respuesta temporal de la velocidad durante los accidentes sigue tres fases principales cuya presencia y duración dependen tanto de  $\alpha$  como de la duración del accidente ( $T_{acc}$ ). Los análisis de entropía y densidad de velocidad confirman transiciones de estados de tráfico ordenados a complejos en función de  $\alpha$  y  $T_{acc}$ . También se observa un fenómeno de "sobrepulso" (overshoot) para  $\alpha = 0.25$ , lo que indica un comportamiento de recuperación elástica del sistema.

## **Dinámica de fusión en materiales de cambio de fase confinados mediante propiedades térmicas efectivas**

V. Domínguez-Rocha<sup>1</sup>, F. Ramírez-Ramírez<sup>2</sup>, José A. Otero<sup>3</sup> y R. Pérez-Álvarez<sup>4</sup>

<sup>1</sup> *Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, A. P. 55-534, 09340 Ciudad de México, México.*

<sup>2</sup> *Centro de Estudios Técnicos, Colegio Superior Agropecuario del Estado de Guerrero, Carretera Iguala-Atenango del Río, km. 21.5, Col Benito Juárez, C.P. 40130, Huitzuco, Gro., México.*

<sup>3</sup> *Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México.*

<sup>4</sup> *Centro de Investigación en Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, México.*

El uso de materiales de cambio de fase (PCM), como la parafina, en sistemas de almacenamiento térmico ha sido ampliamente explorado debido a su capacidad para absorber y liberar grandes cantidades de energía. Sin embargo, la dinámica de fusión en estos sistemas no está determinada únicamente por la distribución de temperatura, sino también por la variación de sus propiedades térmicas efectivas durante el cambio de fase. En este trabajo se estudia la fusión de parafina confinada alrededor de una tubería a temperatura constante mediante un modelo de elemento finito implementado en COMSOL Multiphysics, en el que el cambio de fase se incorpora a través de propiedades efectivas dependientes de la temperatura. A pesar de que la tubería alcanza rápidamente la temperatura impuesta, la evolución del frente de fusión ocurre en una escala temporal significativamente mayor, evidenciando un régimen dominado por el almacenamiento de energía asociado al calor latente. Los resultados muestran que la propagación del frente de fusión sigue un comportamiento característico de procesos difusivos, donde la dinámica global está controlada por la competencia entre la conducción térmica y la variación de las propiedades efectivas del material. Este comportamiento pone de manifiesto la importancia de considerar descripciones efectivas en la modelación de sistemas con PCM.

## **Modelación Numérica y Evaluación Térmica de un Sistema de Almacenamiento de Energía con Materiales de Cambio de Fase**

F.Ramírez-Ramírez<sup>1</sup>, R. Pérez-Álvarez<sup>2</sup>, José Antonio Otero<sup>3</sup>, V. Domínguez-Rocha<sup>4</sup> y Valter Silva Nava<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *Centro de Estudios Técnicos, Colegio Superior Agropecuario del Estado de Guerrero, Carretera Iguala-Atenango del Río, km. 21.5, Col Benito Juárez, C.P. 40130, Huitzuco, Gro., México.*

<sup>2</sup> *Centro de Investigación en Ciencias, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad 1001 Col. Chamilpa, 62209 Cuernavaca, Morelos, México.*

<sup>3</sup> *Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México.*

<sup>4</sup> *Departamento de Física, Universidad Autónoma Metropolitana-Iztapalapa, A. P. 55-534, 09340 Ciudad de México, México.*

En este trabajo se desarrolla un estudio numérico y comparativo de un sistema de almacenamiento térmico utilizando materiales de cambio de fase (PCM) para aplicaciones de calentamiento de agua doméstica. La investigación se centra en el análisis del comportamiento térmico de la parafina como medio de almacenamiento energético, empleando el método de la entalpía y el método de elemento finito mediante el software COMSOL Multiphysics.

El modelo propuesto considera una geometría tridimensional compuesta por tres regiones cilíndricas concéntricas: un conducto interno para la circulación de agua, una capa intermedia de cobre encargada de favorecer la conducción térmica y una región externa de parafina que actúa como material de almacenamiento de energía. El estudio incorpora el acoplamiento entre transferencia de calor en sólidos y fluidos, así como el análisis de flujo laminar dentro del conducto de agua.

Para representar adecuadamente el proceso de cambio de fase del PCM, se implementó una malla móvil que permite seguir la evolución de la interfaz sólido-líquido durante el proceso de fusión. El problema fue resuelto bajo un régimen transitorio, permitiendo evaluar la evolución temporal de la temperatura y del frente de fusión en el sistema.

Los resultados obtenidos muestran que la parafina alcanza una fusión total aproximadamente a los 14400s, demostrando una adecuada capacidad de almacenamiento térmico y estabilidad durante el proceso de transferencia de calor. Además, se presentan comparaciones entre los resultados numéricos y datos experimentales, obteniendo una concordancia satisfactoria.

Este tipo de sistemas representa una alternativa eficiente para el aprovechamiento de energía térmica en aplicaciones domésticas y puede integrarse con calentadores solares para contribuir a la disminución del consumo de combustibles convencionales como el gas LP.

### **AGRADECIMIENTOS**

Agradecemos el apoyo económico de la SECIHTI a través del proyecto CF-2023-G-792

## Analyzing Peptide Torsional Dynamics: An Angular-Displacement PCA Pipeline for Short-Horizon Prediction from Molecular Dynamics

Luis Albrizzi<sup>1</sup>, Gabriel Gayoso<sup>1</sup>, José Colbes<sup>1</sup>, Santiago Di Lella<sup>2</sup>, Christian E. Schaerer<sup>1</sup> y Amaury C. Alvarez<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Polytechnic School, National University of Asuncion, San Lorenzo, Paraguay.

<sup>2</sup> Instituto de Química Biológica (IQIBICEN) CONICET - Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires, Argentina.

<sup>3</sup> Institute of Computing, Federal University of Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, Brazil.

El análisis de la dinámica conformacional de péptidos cortos a partir de simulaciones de dinámica molecular (DM) sigue siendo un desafío debido a la alta dimensionalidad del espacio torsional y la naturaleza periódica de los ángulos diédricos. Este trabajo presenta un flujo de trabajo computacional integrado que combina simulaciones de DM all-atom con un marco analítico de múltiples etapas para caracterizar los patrones de reorganización torsional. Nuestra propuesta introduce una representación de desplazamiento angular ( $\chi$ ) que resuelve las discontinuidades periódicas al centrarse en los cambios torsionales cuadro a cuadro en lugar de las configuraciones absolutas. Analizamos estas coordenadas transformadas mediante un análisis de componentes principales (PCA) espacio-temporal para identificar patrones torsionales colectivos. Comparamos cuantitativamente los ángulos diédricos brutos, la incrustación seno-coseno y la representación de desplazamiento  $\chi$  utilizando la puntuación VAMP. Aplicamos la metodología al péptido DENV-2 (CGYGLC) y al sistema TRP-CAGE. Nuestros resultados identifican patrones jerárquicos de flexibilidad torsional, caracterizados por un núcleo central flexible y dinámicas específicas de región, y reconstruyen la evolución estructural a corto plazo con errores angulares inferiores al 25% y valores de RMSD de 1.0 - 2.1 Å para DENV-2. Este flujo de trabajo proporciona un marco computacionalmente eficiente para analizar la dinámica de reorganización torsional en simulaciones de péptidos.

## **Modos flexionales en vigas de sección transversal variable.**

Alfredo Díaz de Anda

*Instituto de Física “Luis Rivera Terrazas.” Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.*

Motivados por la escasez de trabajos experimentales que reporten el espectro de modos de vibración flexional en vigas con sección transversal variable dentro de un intervalo amplio de frecuencias, en este trabajo presentamos un estudio experimental y numérico detallado de vigas de aluminio con sección transversal variable. Mediante configuraciones adecuadas de transductores acústicos electromagnéticos (EMATs), se logra la excitación y detección selectiva de modos flexionales sin contacto, reduciendo las perturbaciones experimentales. Los resultados muestran señales del llamado segundo espectro por encima de una frecuencia de corte, caracterizado por la aparición de dobletes. La comparación con simulaciones de elementos finitos en COMSOL muestra un excelente acuerdo, con errores relativos menores al 4%. Estos resultados buscan servir como referencia para futuros estudios teóricos sobre vigas con sección transversal variable.

## **Aproximación Neuronal Informada por la Física y Recuperación de Parámetros para Modelos SIR de Transmisión de Enfermedades**

Boris Mederos<sup>1</sup>, Yoanh Almeyda-Espinosa<sup>1</sup>, Jorge Terrazas<sup>1</sup>, Gaizka Ferrara-Rivera<sup>1</sup>, Héctor Camacho-Montes<sup>1</sup>, Amaury Álvarez-Cruz<sup>2</sup>, Reinaldo Rodríguez-Ramos<sup>3</sup> y Oscar L. Cruz-González<sup>4</sup>

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

<sup>2</sup> *Institute of Computing, Federal University of Rio de Janeiro, Ríó de Janeiro, Brazil.*

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

<sup>4</sup> *Aix Marseille Univ, CNRS, Centrale Marseille, IRPHE UMR 7342, Marseille, France.*

Los modelos epidemiológicos compartimentales proporcionan una descripción sencilla e interpretable de la propagación de enfermedades; sin embargo, su aplicación práctica suele depender de la resolución precisa de las ecuaciones que gobiernan la dinámica del sistema y de la estimación de los parámetros de transmisión a partir de observaciones incompletas. En este trabajo se desarrolla una formulación basada en redes neuronales informadas por la física para el modelo Susceptibles–Infectados–Recuperados (SIR). Las variables de estado desconocidas se representan mediante redes neuronales, mientras que los residuos de las ecuaciones diferenciales ordinarias del modelo SIR, las condiciones iniciales y las mediciones epidemiológicas disponibles se integran en una única función objetivo de entrenamiento. Esta construcción permite abordar tanto el problema directo, en el que se reconstruyen las trayectorias epidémicas para parámetros previamente especificados, como el problema inverso, en el que las tasas de infección y recuperación se estiman a partir de los datos observados. Se realizan experimentos numéricos para evaluar la precisión del enfoque propuesto bajo diferentes niveles de observación y escasez de datos. Los resultados muestran que la formulación informada por la física es capaz de recuperar con buena concordancia las dinámicas de las poblaciones susceptibles, infectadas y recuperadas respecto a soluciones de referencia, además de proporcionar estimaciones confiables de los parámetros del modelo. El método propuesto constituye una alternativa computacional flexible para el análisis epidemiológico basado en modelos SIR, especialmente en escenarios donde los métodos numéricos tradicionales deben combinarse con datos epidemiológicos ruidosos o parcialmente observados.

## Un enfoque algebraico para colisiones colineales diátomo–diátomo en la aproximación semiclásica

Rubén Darío Santiago Acosta<sup>1</sup>, Renato Lemus Casillas<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> *Departamento de Ciencias. Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México.*

<sup>2</sup> *Instituto de Ciencias Nucleares, UNAM, México.*

Se presenta un modelo algebraico semiclásico para describir colisiones inelásticas colineales entre dos moléculas diatómicas anharmónicas. El sistema se formula modelando los enlaces moleculares mediante osciladores de Morse y la interacción intermolecular a través de un potencial repulsivo exponencial. En el marco semiclásico, el grado de libertad traslacional se describe mediante una trayectoria clásica analítica, acoplado un Hamiltoniano dependiente del tiempo para los modos vibracionales. Para resolver la dinámica cuántica, se explota la estructura del grupo unitario especial mediante la identificación del álgebra  $SU(2)$  como el álgebra dinámica de los osciladores de Morse. La transferencia de cuantos vibracionales intermoleculares se incorpora introduciendo un grupo intermedio  $SU(2)(AB)$ . El potencial de interacción se expande linealmente en términos de los generadores de los tres grupos  $SU(2)$  involucrados. Minimizando el error cuadrático medio del operador de interacción remanente, se deriva un sistema no lineal de nueve ecuaciones diferenciales ordinarias para los coeficientes de acoplamiento temporal. La integración numérica de este sistema acoplado define las amplitudes del operador de evolución temporal. Las probabilidades de transición vibracional se calculan analíticamente a través de una combinación lineal de productos de tres funciones  $d$  de Wigner asociadas a cada subgrupo. El formalismo se validó mediante la simulación computacional de los sistemas  $N_2 + N_2$  y  $H_2 + H_2$  a diferentes energías de colisión. Las probabilidades obtenidas reproducen las tendencias físicas y los órdenes de magnitud de los cálculos mecanocuánticos exactos. El método demuestra ser una alternativa computacionalmente eficiente frente a otros esquemas.

## **Estimación de las propiedades efectivas de compuestos termoelásticos mediante una homogeneización semianalítica reiterada.**

José A. Otero<sup>1</sup>, Reinaldo Rodríguez-Ramos<sup>2,3</sup>, Yoanh Espinosa-Almeyda<sup>4</sup>.

<sup>1</sup> *Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Estado de México, México.*

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

<sup>3</sup> *PPG-MCCT, Universidade Federal Fluminense, Av. dos Trabalhadores 420, Vila Sta. Cecilia, CP 27255-125 Volta Redonda, RJ, Brazil.*

<sup>4</sup> *Instituto de Ingeniería y Tecnología, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, Av. Del Charro 450 Norte Cd. Juárez, Chihuahua, CP 32310, México.*

Se desarrolla un método de homogeneización reiterada para estimar las propiedades termoelásticas efectivas de un compuesto trifásico que comprende inclusiones esféricas, cada una rodeada por una capa e incrustada en una matriz. La capa contiene inclusiones elipsoidales que conforman una estructura multifásica. Inicialmente, se presentan resultados para un compuesto bifásico que consiste en inclusiones esféricas en una matriz, comparando las propiedades termoelásticas efectivas con los límites variacionales. Posteriormente, se determinan las propiedades efectivas de un compuesto multifásico con inclusiones elipsoidales en una matriz. Esto constituye el primer paso de la homogeneización, que determina las propiedades efectivas de la capa compuesta termoelástica. Finalmente, las propiedades termoelásticas efectivas globales del compuesto trifásico se obtienen mediante una segunda homogeneización. Las propiedades efectivas se evalúan mediante un enfoque semianalítico. En este marco, las ecuaciones que rigen los problemas locales en una celda unitaria se obtienen mediante homogeneización asintótica y se resuelven mediante el método de elementos finitos. Los problemas locales, definidos inicialmente en la celda unitaria periódica completa, se reducen a un octavo de la celda, aprovechando la simetría de la celda y de los campos involucrados. En consecuencia, las condiciones de periodicidad se convierten en condiciones de contorno mixtas. Esta reducción presupone una microestructura periódica y propiedades del material que son funciones pares del sistema de coordenadas local centrado en la celda unitaria. La implementación numérica se realiza en COMSOL Multiphysics, a partir de lo cual se obtienen los coeficientes termoelásticos efectivos.

## **Influencia de la textura cristalográfica y la porosidad en las propiedades elásticas de materiales policristalinos de $\alpha$ -alúmina**

J.D. Gamboa Garay<sup>1</sup>, H. Camacho Montes<sup>1</sup>, Y. Espinosa Almeyda<sup>1</sup>, J.O. Herrera Robles<sup>1</sup>, J.A. Otero Hernández<sup>2</sup>, R. Rodríguez Ramos<sup>3</sup>, B.J. Mederos Madrazo<sup>1</sup>, F.J. Sabina<sup>4</sup>, R.K. Bordia<sup>5</sup>

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

<sup>2</sup> *Tecnológico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Estado de México, México.*

<sup>3</sup> *PPG-MCCT, Universidade Federal Fluminense, Av. dos Trabalhadores 420, Vila Sta. Cecilia, CP 27255-125 Volta Redonda, RJ, Brazil.*

<sup>4</sup> *Instituto de Investigaciones en Matemáticas Aplicadas y en Sistemas, UNAM, México.*

<sup>5</sup> *Clemson University, Carolina del sur, USA.*

La mecánica de materiales compuestos puede aplicarse al estudio de materiales policristalinos considerando cada cristal como una fase independiente. En este trabajo se analiza el efecto combinado de la textura cristalográfica y la porosidad sobre las propiedades elásticas de policristales de  $\alpha$ -alúmina mediante tres enfoques: el Método de Elemento de Volumen Representativo basado en condiciones de frontera de desplazamiento (RVEM-DBC), el Método de Elemento de Volumen Representativo basado en condiciones de frontera de esfuerzo (RVEM-SBC) y el Método Semianalítico de Elementos Finitos (SAFEM). La comparación entre estos métodos constituye una primera etapa para la validación de modelos capaces de relacionar estructura y propiedades en materiales policristalinos. Los resultados muestran que la textura cristalográfica, representada mediante la Función de Distribución de Orientaciones (ODF), permite controlar el grado de anisotropía de las propiedades elásticas, mientras que el incremento de la porosidad reduce la rigidez efectiva y los módulos elásticos del material. La herramienta desarrollada permite describir cuantitativamente estos efectos y constituye una base para el diseño y optimización de materiales policristalinos con propiedades mecánicas específicas.

## **Propiedades efectivas de compósitos micropolares elásticos multifásicos reforzados con fibras cilíndricas concéntricas**

Y. Espinosa-Almeyda<sup>1</sup>, R. Rodríguez-Ramos<sup>2</sup>, J. A. Otero<sup>3</sup>, H. Camacho-Montes<sup>1</sup>, Boris Mederos<sup>1</sup>

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

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

<sup>3</sup>*Tecnologico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Carr. al Lago de Guadalupe Km. 3.5, CP 52926, Edo. de México, México.*

[yoanhealmeyda1209@gmail.com](mailto:yoanhealmeyda1209@gmail.com)

La modelación físico-matemática de materiales compuestos multifásicos desempeña un papel fundamental en la predicción de propiedades efectivas, contribuyendo al diseño de nuevos materiales y a una mejor comprensión de las relaciones entre estructura y propiedades. En el presente trabajo se desarrolla el método de homogeneización asintótica de dos escalas (MHA) para determinar las propiedades efectivas de compósitos elásticos micropolares multifásicos con microestructura periódica, reforzados con fibras cilíndricas unidireccionales y concéntricas. En este marco, el medio periódico está constituido por materiales centrosimétricos y sometido a condiciones de contorno uniformes, así como a condiciones de contacto perfecto en las interfaces entre los constituyentes. Como resultado de la implementación del MHA, se establece el planteamiento matemático de los problemas locales y la formulación analítica de los coeficientes efectivos del material homogeneizado. Finalmente, se presentan resultados numéricos ilustrativos y se discuten. Los resultados obtenidos constituyen una referencia útil para la validación de modelos numéricos y estudios experimentales.

**Palabras clave:** método de homogeneización asintótica, compósitos elásticos micropolares fibrosos, constituyentes centrosimétricos, condiciones de contacto perfecto

## **PINN-Assisted Asymptotic Homogenization of one-dimensional composites with interface effects**

Reinaldo Rodríguez-Ramos<sup>1,2</sup>, Boris Mederos<sup>3</sup>, Yoanh Espinosa-Almeyda<sup>3</sup>, Hector Camacho Montes<sup>3</sup>, Oscar L. Cruz-González<sup>4</sup>, Amaury C. Alvarez<sup>5</sup>, José A. Otero<sup>6</sup>

<sup>1</sup>*Facultad de Matemática y Computación, Universidad de La Habana, San Lázaro y L, Vedado, La Habana, CP 10400, Cuba.*

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

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

<sup>4</sup>*Aix Marseille Université, CNRS, Centrale Marseille, IRPHE UMR 7342, Marseille, France.*

<sup>5</sup>*Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, CP 21941-617, Brasil.*

<sup>6</sup>*Tecnologico de Monterrey, Escuela de Ingeniería y Ciencias, Estado de México, Mexico.*

We present a multiscale computational strategy that integrates two-scale asymptotic homogenization (AHM) and Physics-Informed Neural Networks (PINNs) to estimate the homogenized response of one-dimensional periodic composites containing perfect or imperfect interfaces. Within the homogenization setting, the associated local cell problem is reformulated as a physics-constrained learning task and solved using PINNs. The resulting corrector fields are subsequently employed to evaluate the effective coefficients and to construct the corresponding asymptotic approximation of the heterogeneous solution. To address discontinuities generated by interface conditions and material jumps, the formulation incorporates a two-network representation together with tailored optimization procedures. Although the study is restricted to the one-dimensional case, this configuration provides a controlled benchmark for assessing the accuracy and consistency of the proposed AHM-PINN framework. The model is verified by direct comparison with the solution of the original heterogeneous boundary-value problem. Parametric simulations are performed for several volume fractions, allowing the influence of material contrast on the macroscopic effective behavior to be analyzed.

## **RESÚMENES– SESIÓN DE CARTELES**

## **Acoplamiento fuerte fotón–magnetoexcitón en metamateriales cuánticos: un enfoque de homogenización no local**

P. L. Valdés-Negrin<sup>1</sup>, N. M. Makarov<sup>2</sup>, F. Pérez-Rodríguez<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, México*

<sup>2</sup>*Instituto de Ciencias, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, México*

<sup>3</sup>*Instituto de Física “Ing. Luis Rivera Terrazas”, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 72570, México*

Correo electrónico: pvaldes@ifuap.buap.mx

Se estudia teóricamente la interacción entre modos fotónicos y magnetoexcitones en un metamaterial cuántico formado por un arreglo periódico de capas dieléctricas y semiconductoras que incorporan pozos cuánticos de GaAs sometidos a un campo magnético externo. El análisis se desarrolla mediante una teoría de homogenización no local que considera simultáneamente la no localidad estructural asociada a la periodicidad del sistema y la no localidad cuántica originada por los magnetoexcitones confinados. A partir de esta descripción se obtienen las relaciones de dispersión, la permitividad efectiva dependiente de la frecuencia y del vector de onda, así como la respuesta óptica de estructuras finitas mediante el método de matriz de transferencia. Los resultados muestran la aparición de acoplamiento fuerte entre resonancias magnetoexcitónicas y modos fotónicos de Fabry–Perot, evidenciado por desdoblamiento de Rabi de hasta 7.5 meV. En particular, se identifica un régimen donde dos modos fotónicos consecutivos interactúan simultáneamente con dos resonancias magnetoexcitónicas distintas, generando una estructura polaritónica más compleja que la observada en configuraciones convencionales de una sola resonancia. Además, se demuestra que el uso de medios dieléctricos de alto índice permite controlar la localización de los campos electromagnéticos y optimizar la intensidad del acoplamiento. Estos resultados muestran el potencial de los metamateriales cuánticos no locales como plataformas para el diseño de dispositivos polaritónicos sintonizables y para el estudio de fenómenos avanzados de interacción luz–materia.

### **Agradecimientos**

P.L.V.-N. agradece el apoyo de la beca posdoctoral de SECIHTI

## ESTIMACIÓN DE LA PRODUCCIÓN EN UN INVERNADERO CON INTERNET DE LAS COSAS Y APRENDIZAJE AUTOMÁTICO

Pablo Humberto Hernández Peralta<sup>1</sup>, Outmane Oubram<sup>1</sup>, Pedro Moreno<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM), Cuernavaca 62210, Morelos, México.*

<sup>2</sup>*Facultad de Contaduría, Administración e Informática, Universidad Autónoma del Estado De Morelos (UAEM), Cuernavaca 62209, México.*

Correo electrónico: **pablo.hernandez@fcqei.uaem.edu.mx**

La sobreexplotación de los recursos naturales para hacer eficiente el sector agrícola y cubrir la demanda de la población ha generado serias afectaciones al medio ambiente, como son: la degradación del suelo por el uso desmedido de nutrientes químicos, uso irregular de pesticidas y fungicidas, deforestación o tala ilegal de árboles, solo por mencionar algunos ejemplos. En el entorno de la industria 4.0 surge la agricultura inteligente, que se afianza implementando herramientas tecnológicas para mejorar la productividad, optimizando los recursos disponibles de forma racional. En este sentido, actúa la tecnología de monitoreo implementado en este trabajo mediante un módulo IoT que trabaja censando y almacenando valores de variables que influyen en el crecimiento del cultivo. Se recolectan datos como temperatura, humedad, pH y NPK del suelo, así como temperatura, humedad, presión, luz PAR del ambiente, además del tamaño y peso del fruto producido. Estos datos serán analizados mediante técnicas de Machine Learning para estimar la producción de jitomate. Como resultado de la implementación del módulo recolector de datos durante 90 días se obtuvo un conjunto de datos de 25,900 muestras. Se utilizaron técnicas de normalización y aumento de datos ambientales. Posteriormente, se modeló con un algoritmo de redes neuronales artificiales (RNA), basándose en el algoritmo de retropropagación. El conjunto de datos de entrenamiento y validación D corresponde al 80%, mientras que el conjunto de prueba W representa el 20%. Como métrica de evaluación se utilizó el Error Absoluto Medio (MAE) para comparar el rendimiento. La red con 20 neuronas obtuvo los valores de MAE más bajos (0.18 para peso fresco). Como conclusión, la red neuronal con 20 neuronas en la capa oculta y el algoritmo de retropropagación constituyen la estructura adecuada para modelar este conjunto de datos, demostrando una buena capacidad para estimar la producción de jitomate.

# Influencia del desorden estructural en las propiedades ópticas no lineales de pozos cuánticos $\delta$ -dopados dobles en GaAs

Eddy Rabanales-Marquez<sup>1,2</sup>, Luis M. Gaggero-Sager<sup>3</sup>, Humberto Noverola-Gamas<sup>2</sup>, Outmane Oubram1Autor1<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias Químicas e Ingenierías, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México

<sup>2</sup>División Académica de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Cunduacán, Tabasco, México

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

Correo electrónico: [eddy.rabanales@ujat.mx](mailto:eddy.rabanales@ujat.mx)

El diseño y fabricación a gran escala de dispositivos optoelectrónicos de baja dimensionalidad requiere una comprensión profunda de cómo las variaciones inherentes a los procesos epitaxiales afectan su rendimiento [1-3]. Este trabajo presenta un estudio teórico exhaustivo sobre el impacto del desorden estructural en los coeficientes de rectificación óptica no lineal (NOR), generación de segundo armónico (SHG) y generación de tercer armónico (THG) en pozos cuánticos asimétricos de GaAs con dopaje  $\delta$  tipo n. La estructura electrónica del sistema se determinó resolviendo la ecuación de Schrödinger estacionaria mediante diferencias finitas, en el marco de la aproximación de masa efectiva y el método de Thomas-Fermi para el potencial de confinamiento [4, 5]. Para evaluar la robustez óptica, se generaron 5,000 configuraciones aleatorias introduciendo fluctuaciones del 10%, 20% y 30% en tres parámetros críticos: la densidad bidimensional de impurezas, la distancia de separación entre las capas dopadas y la intensidad del campo eléctrico externo aplicado. Las propiedades ópticas se calcularon empleando el formalismo de la matriz de densidad [4-6]. Los resultados demuestran que las propiedades ópticas exhiben una dependencia altamente diferenciada según el tipo y la magnitud del desorden. Se observó que los coeficientes SHG y THG mantienen una notable robustez frente a fluctuaciones de hasta un 20% en la densidad de dopaje, conservando la información de su pico resonante. En contraste, el coeficiente NOR presenta una sensibilidad extrema a las variaciones en la distancia de separación entre los pozos; la introducción de desorden en este parámetro provoca una atenuación severa y un desplazamiento macroscópico del pico resonante, suprimiendo efectivamente la respuesta NOR debido a la cancelación de contribuciones asimétricas. Sorprendentemente, el desorden asociado al campo eléctrico externo tiene un impacto insignificante en los tres coeficientes.

## Agradecimientos

Los autores agradecen el apoyo de la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación de México (SECIHTI), de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco (beca PISA 2024-1 UJAT) y del Instituto Tecnológico Superior de Comalcalco, así como los recursos computacionales y la experiencia técnica proporcionados por el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS, Grupo de Laboratorios Nacionales CONAHCyT) bajo el proyecto No. 202403063N.

- [1] M. Henini, Molecular beam epitaxy, *Thin Solid Films* 306, 331 (1997).
- [2] F. Joint, et al., GaAs manufacturing processes conditions for micro-and nanoscale devices, *Journal of Manufacturing Processes* 60, 666 (2020).
- [3] H. Dakhlaoui, et al., Numerical study of optical absorption coefficients in manning-like AlGaAs/GaAs double quantum Wells, *Physica E* 147, 115623 (2023).
- [4] H. Sayrac, et al., Modulation of nonlinear optical rectification, second, and third harmonic generation coefficients in n-type quadruple  $\delta$ -doped GaAs quantum wells under external fields. *Physica B* 690, 416252, (2024).
- [5] E. Rabanales-Marquez, H. Noverola-Gamas, O. Oubram, L. M. Gaggero-Sager, Effects of dopant interlayer distance, magnetic field and electric field on nonlinear optical rectification, second and third harmonic generation in double  $\delta$ -doped quantum Wells, *Solid State Communications* 403, 115951, (2025).
- [6] H. Noverola-Gamas, L. M. Rojas, S. Azalim, O. Oubram. Disorder effect on intersubband optical absorption of n-type  $\delta$ -doped quantum well in GaAs. *Journal of Physics: Condensed Matter* 40, 405602, (2023).

# Control Geométrico de las Oscilaciones Aharonov-Bohm en Anillos Cuánticos de Fosforeno por Gating Electroestático

Nancy Liliana Morales Villamizar<sup>1</sup>, Jhon Freddy Torres Gómez<sup>1</sup>, Rogelio Rodríguez González<sup>1</sup>, Jaime Raúl Suarez López<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Unidad académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, 98160 Zacatecas, México.

E-mail: [nancy.moraleslummat@uaz.edu.mx](mailto:nancy.moraleslummat@uaz.edu.mx), [jhon.torreslummat@uaz.edu.mx](mailto:jhon.torreslummat@uaz.edu.mx), [rogeliorg@uaz.edu.mx](mailto:rogeliorg@uaz.edu.mx),  
[jrsuarez@uaz.edu.mx](mailto:jrsuarez@uaz.edu.mx)

En este trabajo estudiamos teóricamente las propiedades electrónicas de un anillo cuántico de fosforeno monocapa bajo la influencia de un campo magnético externo. El sistema se modela utilizando un potencial de confinamiento de paredes rígidas mediante *gating* electrostático, mientras que la geometría de sus bordes se deforma analíticamente con la ecuación de la superelipse. Para describir los estados de baja energía, empleamos un hamiltoniano efectivo bajo el gauge simétrico que incorpora la anisotropía intrínseca del material y el desdoblamiento Zeeman inducido por un campo magnético perpendicular al plano del anillo.

La ecuación de Schrödinger se resolvió numéricamente mediante el método de diferencias finitas en una malla bidimensional. Los resultados demuestran que la variación en la geometría de los bordes permite controlar las oscilaciones de Aharonov-Bohm en el espectro energético. Se observa que las transiciones entre los niveles energéticos y el periodo de las oscilaciones muestran una fuerte dependencia con el parámetro de forma de la superelipse, el cual altera las trayectorias de interferencia cuántica.

Finalmente, este control geométrico asistido por *gating* electrostático ofrece un mecanismo sintonizable para el diseño de dispositivos nanospintrónicos y de información cuántica basados en la geometría.

## AGRADECIMIENTOS

N.L.M.V agradece a SECIHTI por la beca de investigación doctoral.

[1] T. Thakur and B. Szafran, Aharonov-bohm oscillations in phosphorene quantum rings: Mass anisotropy compensation by confinement potential, *Phys. Rev. B* **105**, 165309 (2022).

[2] B. Szafran, Electrostatic quantum dot confinement in phosphorene, *Phys. Rev. B* **101**, 235313 (2020).  
L. L. Li, D. Moldovan, P. Vasilopoulos, and F. M. Peeters, Aharonov-bohm oscillations in phosphorene quantum rings, *Phys. Rev. B* **95**, 205426 (2017).

## Efecto de índice casi cero en estructura fotónica de silicio con asimetría de reflexión.

Marco A. Tun-Carrillo (EXPOSITOR)<sup>1</sup>, Miguel E. Mora-Ramos<sup>2</sup>, Hernán A. Gómez-Urrea<sup>3</sup>, Ignacio Pérez-Quintana<sup>4</sup>

<sup>1</sup> Posgrado en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad No. 1001, CP. 62209, Cuernavaca, Morelos, México

<sup>2</sup> Centro de Investigación en Ciencias-IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Av. Universidad No.

1001, CP. 62209, Cuernavaca, Morelos, México

<sup>3</sup> Instituto de Ciencias Básicas, Universidad de Medellín, 050026, Medellín, Colombia

<sup>4</sup> Facultad de Ingeniería, Universidad Autónoma de Yucatán, Industrias No Contaminantes S/N, Sin Nombre de Col 27, CP. 97302, Mérida, Yucatán, México.

Correo electrónico: [marco.tun@uaem.edu.mx](mailto:marco.tun@uaem.edu.mx)

La fotónica moderna ha avanzado significativamente hacia la manipulación extrema de la luz mediante el desarrollo de materiales con un índice de refracción cercano a cero (NZI) y la ingeniería precisa de la simetría estructural. Los materiales NZI permiten fenómenos electromagnéticos inusuales, como la propagación con fase constante y el desacoplamiento de las características espaciales y temporales del campo [1]. Usando un celda unitaria carente de simetrías por reflexión, es posible obtener un efecto de índice casi cero para un rango de longitud de onda amplio (~300 nm) tanto para un modo de incidencia TE como TM. Estudios iniciales de la evolución de la celda brindan la posibilidad de estar ante un caso de protección topológica de los modos de índice casi cero.

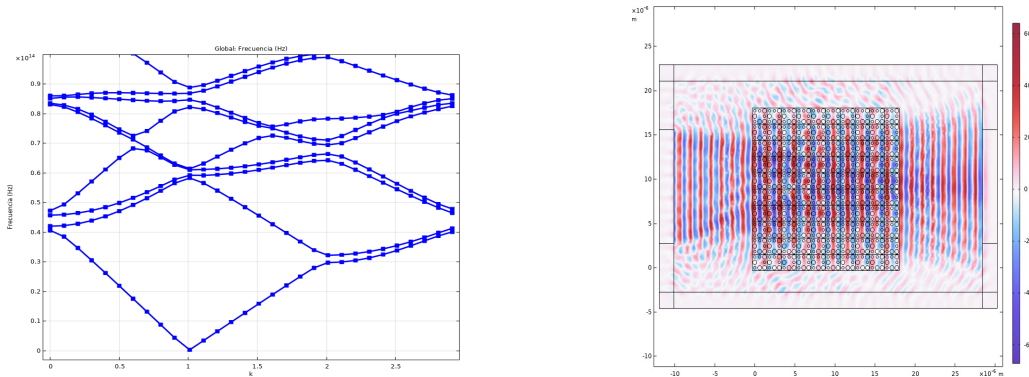


Figura 1. (a) Diagrama de bandas para el modo TE. (b) efecto de índice casi cero a la frecuencia de  $6.5 \times 10^{13}$  Hz predicho por el diagrama de bandas en una simulación finita del cristal.

[1] Larissa Vertchenko, Maxim Nikitin y Andrei Lavrinenko, **Near-zero-index platform in photonics: tutorial**, Journal of the Optical Society of America B Vol. 40, Num. 6 (2023).

## Propiedades Termoeléctricas en Superredes de Potenciales no Convencionales Basadas en MoS<sub>2</sub>

A. J. de la Rosa-Jasso<sup>1</sup>, I. Rodríguez- Vargas<sup>1</sup>, J. A. Briones-Torres<sup>2</sup>

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

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

Correo electrónico: [alejandra.delarosa@uaz.edu.mx](mailto:alejandra.delarosa@uaz.edu.mx)

Los dispositivos termoeléctricos enfrentan un desafío fundamental asociado a la incompatibilidad entre un alto rendimiento y una elevada potencia de salida. Este compromiso surge porque los parámetros que favorecen un alto coeficiente de Seebeck suelen afectar negativamente la conductividad eléctrica. Una estrategia prometedora para superar esta limitación consiste en el uso de superredes no convencionales capaces de inducir espectros de transmisión con forma tipo boxcar, los cuales permiten optimizar simultáneamente la conversión de energía y la potencia al favorecer un filtrado energético selectivo. En este contexto, los sistemas bidimensionales (2D) han cobrado gran relevancia desde que Mildred Dresselhaus y L.

D. Hicks demostraron teóricamente en 1993 que materiales con bajo desempeño en bulto pueden exhibir valores significativamente mayores de la figura de mérito (ZT) al reducir su dimensionalidad [1, 2]. Este resultado estableció que los sistemas de baja dimensión pueden superar a los materiales a granel en términos de desempeño energético. De esta manera, materiales 2D como MoS<sub>2</sub> han atraído especial atención, ya que permiten un control preciso del transporte electrónico y la optimización conjunta de sus propiedades de transporte. En este trabajo se investiga el transporte electrónico en superredes no convencionales de MoS<sub>2</sub> mediante la ingeniería de perfiles de potencial periódicos y gaussianos en barreras y pozos, definidos como potenciales electrostáticos con amplitudes de 25 meV para las barreras y de -3 meV para los pozos, con el objetivo de inducir mecanismos de filtrado energético que mejoren su desempeño. En particular, los perfiles gaussianos permiten aproximar una transmitancia tipo boxcar. El análisis se realiza utilizando el método de matrices de transferencia para calcular la transmitancia electrónica dentro del marco de la teoría de Landauer en sistemas de baja dimensionalidad. A partir de estos resultados, se obtienen la conductancia, el coeficiente de Seebeck, la conductividad térmica electrónica, el factor de potencia y la figura de mérito ZTe, evaluando su dependencia con la energía, el potencial químico y la temperatura.

### Agradecimientos

Los autores agradecen al 2D Materials Research Group (2DMRG) de la Universidad Autónoma de Zacatecas (UAZ), México, por proporcionar un entorno de investigación colaborativo. Asimismo, se agradece el apoyo financiero de SECITHI a través de una beca de posgrado.

[1] M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, X. Sun, Z. Zhang, S. B. Cronin, J. Y. Y. T. Koga, and G. Chen, The promise of low-dimensional thermoelectric materials, *Microscale Thermophysical Engineering* 3, 89 (1999).

[2] M. Dresselhaus, G. Chen, M. Tang, R. Yang, H. Lee, D. Wang, Z. Ren, J.-P. Fleurial, and P. Gogna, New directions for low-dimensional thermoelectric materials, *Advanced Materials* 19, 1043 (2007).

## Estudio de la dimensión fractal y análisis espectral de potencias en geometrías complejas 2D

G. A. Navarro-López<sup>1</sup>, R. Rodríguez-González<sup>1</sup>, R. D. Valdez-Cepeda<sup>2,3</sup> y

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,

<sup>2</sup>Centro Regional Universitario Norte Centro, Universidad Autónoma Chapingo.

<sup>3</sup>Unidad Académica de Matemáticas, Universidad Autónoma de Zacatecas.

E-mail: [ganavarrolopez@uaz.edu.mx](mailto:ganavarrolopez@uaz.edu.mx)

Gracias a la revolución que trajeron consigo los materiales bidimensionales (2D) y sus exóticas propiedades físicas, el estudio de estructuras complejas ha cobrado relevancia, especialmente por sus aplicaciones tecnológicas en el área de los semiconductores o la nanotecnología. En este trabajo usamos el método de análisis espectral de potencias (PSD, por sus siglas en inglés) para estudiar los espectros de conductancia (G) en estructuras aperiódicas tipo Cantor basadas en la bicapa de grafeno (BLG), con la finalidad de lograr identificar las energías de Fermi dominantes con mayor contribución en G [1]. Con ese propósito, empleamos un esquema de transmisión para el transporte electrónico y recurriendo al formalismo de Landauer-Büttiker calculamos los espectros de G para diferentes generaciones (N) de la estructura fractal. Así mismo, calculamos la dimensión fractal de las curvas de conductancia y del perfil de barreras de potencial, con el objetivo de comparar la estrecha relación entre el transporte electrónico y la geometría autosimilar empleada. En este caso, la fractalidad de las curvas de G se determina mediante el PSD, mientras que la dimensión fractal del perfil de barreras de potencial se calcula con el método de conteo de cajas (BC). Hasta el momento, es la primera vez que se reportan este tipo de resultados para la BLG.

### AGRADECIMIENTOS

G.A.N.L. agradece al **SECIHTI** por el apoyo financiero para los estudios de doctorado.

[1] R. Rodríguez-González, R. D. Valdez-Cepeda, and I. Rodríguez-Vargas, Fractal electronic transport in graphene cantor structures by means of power spectrum analysis, *Physical Review B* **112**, [10.1103/vllh-h24p](https://doi.org/10.1103/vllh-h24p) (2025).

## Transmitancia tipo “boxcar shape” en estructuras no convencionales basadas en siliceno

Marla N. Hernández-Delgado, R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas

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

Correo electrónico: [marlanayeli1826@gmail.com](mailto:marlanayeli1826@gmail.com)

Se estudian la transmitancia idónea para encontrar un equilibrio de optimización de propiedades termoeléctricas en estructuras no convencionales basadas en siliceno, para ello implementamos estructuras con una distribución gaussiana en los anchos y altos de la región activa, con la finalidad de obtener ventanas de transmisión con alta probabilidad lo que se conoce como “boxcar shape” [1, 2]. Estos sistemas se generan al colocar una capa de siliceno sobre un sustrato dieléctrico de soporte como SiO<sub>2</sub>, el siliceno se cubre con un sustrato protector para evitar su degradación, posteriormente se depositan electrodos ferromagnéticos (FMEs) sobre el siliceno. Para ello se describen los portadores de carga a través de un Hamiltoniano de baja energía para siliceno. Nuestra metodología se basa en el método de Matriz de Transferencia para obtener la transmisión para los diferentes componentes de espines y valles. Además, a través del esquema de transporte de Landauer-Büttiker se obtiene la conductancia y con ayuda de los coeficientes de transporte analizamos el impacto de sus propiedades termoeléctricas como el coeficiente Seebeck, figura de mérito (ZT), la potencia máxima y la eficiencia a máxima potencia [3].

### Agradecimientos

M.N.-H-D agradece a SECIHTI por la beca de posgrado para el doctorado.

- [1] Whitney, R. S. (2014). Most efficient quantum thermoelectric at finite power output. *Physical Review Letters*, 112(13), 130601.
- [2] Mukherjee, S., & Muralidharan, B. (2019). Electronic Fabry-Perot cavity engineered nanoscale thermoelectric generators. *Physical Review Applied*, 12(2), 024038.
- [3] Priyadarshi, P., Sharma, A., Mukherjee, S., & Muralidharan, B. (2018). Superlattice design for optimal thermoelectric generator performance. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 51(18), 185301.

## Efecto de la aperiodicidad en dispositivos versátiles basados en $\text{WSe}_2$

L.A. Díaz-Valerio, S. Molina-Valdovinos, R. Rodríguez-González, I. Rodríguez-Vargas

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

Correo electrónico: luisdiaz@uaz.edu.mx

En este trabajo se estudian propiedades físicas como la polarización de espines-valles y la magnetorresistencia de tunelamiento (TMR) en estructuras aperiódicas basadas en diseleniuro de tungsteno ( $\text{WSe}_2$  por sus siglas en inglés). Se aplica el efecto de proximidad magnética sobre el material  $\text{WSe}_2$ , es decir, se colocan tiras ferromagnéticas sobre el  $\text{WSe}_2$  de forma aperiódica en las regiones de barrera generando una estructura tipo Cantor, obteniendo propiedades magnéticas. La matriz de transferencia nos ayuda a calcular la transmitancia, estudiamos dos tipos de estructuras fractales, el Cantor simétrico y el Cantor asimétrico, tomando en cuenta dos configuraciones paralelas (PM) y antiparalela (AM). Por último y no menos importante se obtienen polarizaciones de espines-valles efectivas y buenas ventanas de TMR, dando origen a lo que se conoce como dispositivos versátiles en TMDs [1,2].

### Agradecimientos

L. A. D.-V. agradece a SECIHTI por la beca otorgada para los estudios de doctorado.

[1] D. Wang, Z. Huang, Y. Zhang, and G. Jin, Phys. Rev. B **93**, 195425 (2016).

[2] J. G. Rojas-Briseño, M. A. Flores-Carranza, P. Villasana-Mercado, S. Molina-Valdovinos, and I. Rodríguez-Vargas, Phys. Rev. B **103**, 155431 (2021).

## **Efecto del desorden estructural sobre propiedades ópticas no lineales de pozos cuánticos $\delta$ -dopados dobles en GaAs**

Eddy Rabanales-Marquez<sup>1,2</sup>, Luis M. Gaggero-Sager<sup>3</sup>, Humberto Noverola-Gamas<sup>2</sup>, Outmane Oubram<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>*Facultad de Ciencias Químicas e Ingenierías, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, Morelos, México*

<sup>2</sup>*División Académica de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco, Cunduacán, Tabasco, México*

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

Correo electrónico: [eddy.rabanales@ujat.mx](mailto:eddy.rabanales@ujat.mx), [rabasoft@gmail.com](mailto:rabasoft@gmail.com)

El diseño de dispositivos optoelectrónicos de baja dimensionalidad exige comprender cómo las variaciones epitaxiales alteran su rendimiento [1-3]. Este trabajo evalúa teóricamente el impacto del desorden estructural en los coeficientes ópticos no lineales (NOR, SHG y THG) de pozos cuánticos asimétricos de GaAs con dopaje  $\delta$  tipo n. Modelamos la estructura electrónica resolviendo la ecuación de Schrödinger en el marco del método de Thomas-Fermi [4, 5] y calculamos la respuesta óptica mediante el formalismo de la matriz de densidad [4-6]. Para evaluar la robustez de los coeficientes ópticos, simulamos 5,000 configuraciones aleatorias introduciendo fluctuaciones del 10%, 20% y 30% en tres parámetros: densidad de impurezas, separación entre capas dopadas y campo eléctrico externo. Los resultados revelan respuestas contrastantes: mientras SHG y THG son notablemente robustos (conservando su pico resonante ante fluctuaciones de hasta 20% en el dopaje), NOR es extremadamente sensible a variaciones en la distancia entre capas, sufriendo una atenuación severa y un desplazamiento por interferencia destructiva. Sorprendentemente, el desorden en el campo eléctrico externo mostró un impacto nulo en los tres coeficientes.

### **Agradecimientos**

Los autores agradecen el apoyo de la secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación de México (SECIHTI), de la Universidad Juárez Autónoma de Tabasco (beca PISA 2024-1 UJAT) y del Instituto Tecnológico Superior de Comalcalco, así como los recursos computacionales y la experiencia técnica proporcionados por el Laboratorio Nacional de Supercómputo del Sureste de México (LNS, Grupo de Laboratorios Nacionales CONAHCyT) bajo el proyecto No. 202403063N.

- [1] M. Henini, Molecular beam epitaxy, *Thin Solid Films* **306**, 331 (1997).
- [2] F. Joint, *et al.*, GaAs manufacturing processes conditions for micro-and nanoscale devices, *Journal of Manufacturing Processes* **60**, 666 (2020).
- [3] H. Dakhlaoui, *et al.*, Numerical study of optical absorption coefficients in manning-like AlGaAs/GaAs double quantum Wells, *Physica E* **147**, 115623 (2023). H. Sayrac, *et al.*, Modulation of nonlinear optical rectification, second, and third harmonic generation coefficients in n-type quadruple  $\delta$ -doped GaAs quantum wells under external fields. *Physica B* **690**, 416252, (2024).
- [4] E. Rabanales-Marquez, H. Noverola-Gamas, O. Oubram, L. M. Gaggero-Sager, Effects of dopant interlayer distance, magnetic field and electric field on nonlinear optical rectification, second and third harmonic generation in double  $\delta$ -doped quantum Wells, *Solid State Communications* **403**, 115951, (2025).
- [5] H. Noverola-Gamas, L. M. Rojas, S. Azalim, O. Oubram. Disorder effect on intersubband optical absorption of n-type  $\delta$ -doped quantum well in GaAs. *Journal of Physics: Condensed Matter* **40**, 405602, (2023).

## Estados de borde topológicos inducidos por la manipulación de paredes de dominio en puntos cuánticos de bicapa de grafeno

Jhon Freddy Torres Gómez<sup>1</sup>, Rolando Pérez Álvarez<sup>2</sup>, Carlos Iván Cabrera Perdomo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Unidad académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, 98160 Zacatecas, México.

<sup>2</sup>Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 62209 Cuernavaca, Morelos, México.

E-mail: [jhon.torreslumat@uaz.edu.mx](mailto:jhon.torreslumat@uaz.edu.mx), [rpa@uaem.mx](mailto:rpa@uaem.mx), [carlos.cabrera@uaz.edu.mx](mailto:carlos.cabrera@uaz.edu.mx)

En el límite entre dominios con invariantes topológicos de volumen distintos, el principio de correspondencia volumen-borde [1] establece que pueden surgir modos localizados en la frontera, robustos e inmunes a impurezas o perturbaciones geométricas, lo que representa un mecanismo de confinamiento topológico.

En el presente trabajo se reporta la obtención de estados de borde topológicos mediante la manipulación de paredes de dominio con potenciales de confinamiento de tipo masivo en fronteras cerradas. Particularmente, analizamos una geometría de punto de forma circular en bicapa de grafeno, con un término de masa que cambia de signo, es decir, una alineación de bandas invertida, en la región interior. En la bicapa de grafeno, cuando se aplica una polarización electrostática entre las capas, se abre una banda prohibida (*gap*) en la estructura de bandas. Además, existe la posibilidad de confinamiento topológico con un cambio de signo en el potencial de confinamiento en la frontera del punto cuántico a lo largo de la dirección radial. La geometría del punto está definida electrostáticamente por la región del potencial de confinamiento. Para puntos cuánticos de forma circular, se reportan expresiones analíticas dependientes del grado de libertad de valle para los pseudoespinores de cuatro componentes autoestados del Hamiltoniano a bajas energías de la bicapa de grafeno [2]. Nuestros resultados demuestran que mediante la manipulación de la pared de dominio, emergen estados de borde quirales dentro del *gap* localizados en la frontera del punto. Además, se obtienen estados de energía cero doblemente degenerados, sin tener en cuenta los espines, para valores específicos de la altura del potencial en los dos dominios y el radio del punto. También, se reporta la relación de dispersión entre energía y momento angular para excitaciones dentro del *gap*. El control topológico y de valle del sistema muestra su potencial aplicabilidad en dispositivos valletrónicos.

### AGRADECIMIENTOS

J.F.T.G agradece a SECIHTI por la beca de investigación doctoral.

- [1] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
- [2] E. McCann and M. Koshino, The electronic properties of bilayer graphene, *Reports on Progress in Physics* **76**, 056503 (2013).

## **Polarization and Valley-Spin Transport in Ferromagnetic-Silicene/Germanene/Ferromagnetic-Silicene Lateral Heterostructure**

B. D. Gutierrez-Reynaa<sup>1</sup>, M. Miniya<sup>2</sup>, O. Oubram<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup> *Unidad Académica de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma de Nayarit, 63155 Tepic, Nayarit, México*

Correo electrónico: [brian.gutierrez@fcqe.uaem.edu.mx](mailto:brian.gutierrez@fcqe.uaem.edu.mx)

In this work, we investigate the Polarization and Valley-Spin Transport in Ferromagnetic-Silicene/Germanene/Ferromagnetic-Silicene Lateral Heterostructure. The transmission, conductance, and polarization are calculated using the transfer matrix method and the Landauer– Büttiker formalism. Our results show that the on-site potential and the exchange energy in the silicene regions affect the conductance of the four conduction channels in distinct ways. Moreover, fully spin and valley polarization can be achieved by tuning either the on-site potential or the exchange energy. This study provides valuable insights for the field of nanoelectronics, opening new avenues for the experimental realization and control of spin-valleytronic properties in engineered two-dimensional heterostructures based on silicene and germanene.

## Defectos estructurales y fotoluminiscencia de sistemas de CaTiO<sub>3</sub> dopados con Ce/Dy

Andrea Danielle Cancino Moreno<sup>1</sup>, Stephany Natasha Arellano Ahumada<sup>2</sup>, Arturo López Marure<sup>1</sup>,  
Daniel Ramírez Rosales<sup>2</sup>

<sup>1</sup> IPN-Centro de Investigación en Ciencia Aplicada y Tecnología Avanzada, CICATA “Altamira”

<sup>2</sup> IPN-Escuela Superior de Física y Matemáticas, ESFM

Correo electrónico: adaniellecm@gmail.com

El titanato de calcio es un óxido tipo perovskita con alta estabilidad química y baja energía de fonones ( $\sim 650 \text{ cm}^{-1}$ ) que lo hacen atractivo como matriz huésped. Este sistema tiene la capacidad de generar defectos como vacancias de oxígeno las cuales suelen estar involucradas en las propiedades luminiscentes del fósforo. En el presente estudio se analizó la influencia de los dopantes Ce y Dy en las propiedades estructurales y luminiscentes de CaTiO<sub>3</sub>. Se sintetizaron cuatro sistemas: puro, dopado con Ce, dopado con Dy y co-dopado con Ce/Dy por el método sol-gel. La estructura cristalina se analizó mediante DRX, los defectos cristalinos mediante resonancia paramagnética electrónica (EPR *por sus siglas en inglés*) y las propiedades luminiscentes mediante espectroscopía de fotoluminiscencia ( $\lambda_{\text{exc}} = 375 \text{ nm}$ ). Todos los sistemas tienen estructura ortorrómbica, los sistemas puro y dopado con Dy presentaron mayor micro-deformación ( $1.83 \times 10^{-3}$  y  $1.36 \times 10^{-3}$  respectivamente), se identificaron defectos como vacancias de oxígeno, así como la reducción de Ti<sup>4+</sup> a Ti<sup>3+</sup>, se obtuvieron emisiones a 420, 550 y 800 nm asociadas a defectos estructurales del CaTiO<sub>3</sub> y emisiones a 480 y 572 nm correspondientes a las transiciones  $^4F_{9/2} \rightarrow ^4F_{15/2}$  y  $^4F_{9/2} \rightarrow ^4F_{13/2}$  del Dy solo para el sistema dopado con Dy. La luminiscencia en los sistemas de CaTiO<sub>3</sub> está regida por el balance entre el orden-desorden estructural y la presencia de defectos puntuales en la red cristalina de la matriz huésped.

### Agradecimientos

A la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación (SECIHTI) por la beca doctoral (CVU: 1009053), a la SIP-IPN por los proyectos 20251105 y 20260206, al Dr. Jorge Roberto Vargas García por su apoyo en la caracterización de difracción de rayos-X.

## **Polarización de espín-valle y magnetorresistencia de efecto túnel inducidas por tiras antiferromagnéticas sobre siliceno**

A. Sánchez-Ortiz<sup>1</sup>, I. Rodríguez-Vargas<sup>1</sup>, S. Molina-Valdovinos<sup>1</sup>, J.G. Rojas-Briseño<sup>1</sup>

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

Correo electrónico: [asanchez.ortiz@uaz.edu.mx](mailto:asanchez.ortiz@uaz.edu.mx)

Los materiales magnéticos son de gran relevancia en la aplicación de dispositivos. Unos de los más prometedores son los antiferromagnéticos (AFMs). En particular, combinados con materiales bidimensionales como siliceno, pueden ser aptos para la aplicación en dispositivos versátiles. El siliceno tiene un band gap intrínseco debido al fuerte acoplamiento espín-órbita. La interacción con materiales AFMs modula dicho band gap. Además, el contacto entre el material AFM y el siliceno genera un potencial de intercambio ( $h_{AFM}$ ) el cual desplaza el band gap hacia energías positivas o negativas dependiendo del espín. En este proyecto estudiamos un dispositivo tipo válvula de espín asimétrico (AFM/AFI/NM) mediante tiras antiferromagnéticas sobre una sábana de siliceno. En este sistema se estudia la probabilidad de transmisión obtenida mediante el método de la matriz de transferencia, la conductancia del sistema se calcula bajo el formalismo de Landauer-Büttiker y los perfiles magnéticos paralelos (PM) y antiparalelos (AM) se obtienen modulando la dirección de la magnetización de las regiones AFM y AFI. Para después obtener la polarización de valles y espines; y su respuesta magnetorresistiva (magnetorresistencia de efecto túnel, TMR). Las regiones perfectas de polarización de valle, espín y respuesta anómala de TMR se obtienen considerando solo la interacción de las tiras AFMs. Considerando un potencial externo ( $4.5 \Delta_{SO}$ ) se obtiene respuesta alta y positiva de TMR. El incremento del ancho en la región AFI (de  $1.0 l_{SO}$  a  $3.0 l_{SO}$ ) aumenta la TMR de 135% a 237%, respectivamente, y las regiones efectivas de polarización de valle y espín también se amplían.

### **Agradecimientos**

Agradezco al SECIHTI por el apoyo otorgado (CVU: 792013).

# Fuzzy Logic-Driven Cellular Automaton for Pedestrian-Vehicle Interaction at Crosswalks

Jeferson Daniel Rosero Benavides<sup>1</sup>, José Roberto Pérez Cruz<sup>2</sup>, Nouredine Lakoïari<sup>3</sup>

<sup>1</sup>*Department of Computer Science, Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE),*

<sup>2</sup>*Department of Computer Science, Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE),*

<sup>3</sup>*Department of Computer Science, Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE),  
Puebla 72840, Mexico*

Correo electrónico: jdannyrb@inaoe.mx

We propose a new cellular automaton model to simulate traffic and pedestrian interactions near a crosswalk. Pedestrians make their decisions using fuzzy logic, waiting or crossing, thereby introducing uncertainty into the local dynamics. The observations suggest that these local interactions could produce macroscopic consequences, such as Bose-Einstein condensation, resulting in vehicle queues being squeezed ahead of the crosswalk and free space accumulating behind it. This pedestrian-driven behavior acts as a bottleneck, significantly affecting both vehicle dynamics and traffic flow. A phase diagram for different configurations of the system is presented. It illustrates that the region is characterized by four distinct phases, where the traffic flow is uncoupled from the injection rate of vehicles and depends only on pedestrian input. Above a certain value, the system makes a transition in which vehicle traffic is entirely stopped, leading to zero flow.

## Cristales fotónicos temporales hiperbólicos

Antonio Mayorquin Galicia<sup>1</sup>, Shunashi Guadalupe Castillo López<sup>2</sup>

<sup>1,2</sup> *Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México*

Correo electrónico:

<sup>1</sup> mayorquin@estudiantes.fisica.unam.mx

<sup>2</sup> shunashi@fisica.unam.mx

Este trabajo estudia cristales fotónicos temporales anisotrópicos (APTCs) uniaxiales con dispersión óptica, con énfasis en el régimen de dispersión hiperbólica. En sistemas isotrópicos, la modulación temporal permite conversión de frecuencia y amplificación paramétrica mediante la formación de bandas en el espacio de momento. [1]

La anisotropía introduce una respuesta dependiente de la dirección y la polarización. [2] En el régimen hiperbólico, además, aparecen modos de alto momento y una alta densidad fotónica de estados, relevantes para explorar la focalización de sublongitud de onda y física de campos intensos. [3]

Con esto en mente, el objetivo de este trabajo es caracterizar, mediante análisis espectral, como el régimen hiperbólico modifica los modos soportados, las brechas de momento y la amplificación de ondas en APTCs uniaxiales.

[1] Mohammad M. Asgari, Puneet Garg, Xuchen Wang, Mohammad S. Mirmoosa, Carsten Rockstuhl, and Viktor Asadchy, *Theory and applications of photonic time crystals: a tutorial*, **Adv. Opt. Photon.** 16, 958-1063 (2024)

[2] H. Li, S. Yin, H. He, J. Xu, A. Alù, and B. Shapiro, *Stationary Charge Radiation in Anisotropic Photonic Time Crystals*, **Phys. Rev. Lett.** 130, 093803 (2023).

[3] E. E. Narimanov and B. Shapiro, *Carrier Drift Modulation and the Hyperbolic Time Crystals*, **arXiv:2601.00547** (2026).

## Efecto del campo de láser intenso y del voltaje de contacto en las propiedades ópticas del triple $\delta$ -MIGFET en alta frecuencia (THz)

Carlos Rosales de Jesús<sup>1</sup>, Eddy Rabanales-Marquez<sup>1,2</sup>, Yair Alejandro Gutierrez-Alvarez<sup>1</sup>,  
Humberto Noverola-Gamas<sup>2</sup> y Outmane Oubram<sup>1</sup>.

<sup>1</sup> *Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos*

<sup>2</sup> *División Académica de Ingeniería y Arquitectura, Universidad Juárez Autónoma de Tabasco*

Correo electrónico: [carlos.rosales@fcqei.uaem.edu.mx](mailto:carlos.rosales@fcqei.uaem.edu.mx)

Este trabajo presenta un estudio teórico enfocado en analizar las propiedades ópticas y electrónicas del dispositivo triple  $\delta$ -MIGFET bajo la influencia de un campo láser intenso y voltaje de contacto. Utilizando las aproximaciones de Thomas-Fermi y de masa efectiva, se modela la distribución energética en las tres capas  $\delta$ -dopadas. Se evalúan parámetros críticos como el coeficiente de absorción, el cambio en el índice de refracción y la rectificación óptica no lineal. El estudio se sustenta en un diseño teórico con parámetros específicos, permitiendo identificar el rango óptimo de operación y el umbral del dispositivo. Esta investigación cobra especial relevancia en aplicaciones del triple  $\delta$ -MIGFET en tecnologías emergentes como telecomunicaciones 6G [1-3], sistemas avanzados de sensores, moduladores y mezcladores de radiofrecuencia. Los resultados proporcionan una base sólida para optimizar estos transistores en aplicaciones tecnológicas de próxima generación.

### Agradecimientos

Se agradece el apoyo del Mto. Eddy Rabanales-Marqueza, Mto. Yair Alejandro Gutierrez-Alvarez, Dr. Humberto Noverola Gamas y Dr. Outmane Oubram

- [1] P. Sarkar and A. Saha, Evolution of 6g and terahertz communication, in *Optical to Terahertz Engineering*, edited by A. Saha, A. Biswas, K. Ghosh, and N. Mukhopadhyay (Springer Nature Singapore, Singapore, 2023) pp. 45–58.
- [2] M. F. Pereira and O. Shulika, THz for CBRN and explosives detection and diagnosis (Springer, 2017).
- [3] S. Tripathi, N. V. Sabu, A. K. Gupta, and H. S. Dhillon, Millimeter-wave and terahertz spectrum for 6g wireless, in *6G Mobile Wireless Networks* (Springer, 2021) pp. 83–121.

## Termalización en una cadena tipo SSH del modelo de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou

Jose Angel Ake Jimenez<sup>1</sup>, Gerardo García Naumis<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Física. Universidad Nacional Autónoma de México*

<sup>2</sup>*Instituto de Física. Universidad Nacional Autónoma de México*

Correo electrónico:

akejja@estudiantes.fisica.unam.mx

naumis@fisica.unam.mx

Estudiamos cómo un gap fonónico sintonizable controla la terminalización en cadenas clásicas no lineales. Consideramos una cadena dimerizada de Fermi-Pasta-Ulam-Tsingou con constantes de resorte alternadas sometida a no linealidades cúbicas. El acoplamiento interbanda está mediado por resonancias de tres ondas que requieren alineación frecuencial para mezclar modos acústicos y ópticos. Encontramos una transición abrupta cerca de para dimerización débil, resonancias accesibles permiten transferencia rápida de energía; para el gap supera la amplificación espectral no lineal y aísla los sectores. Los términos de acoplamiento

## Modelo efectivo a dos bandas para el confinamiento topológico en puntos cuánticos de bicapa de grafeno

Jhon Freddy Torres Gómez<sup>1</sup>, Rolando Pérez Álvarez<sup>2</sup>, Carlos Iván Cabrera Perdomo<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Unidad académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia, Universidad Autónoma de Zacatecas, 98160 Zacatecas, México.*

<sup>2</sup>*Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, 62209 Cuernavaca, Morelos, México.*

E-mail: [jhon.torreslumat@uaz.edu.mx](mailto:jhon.torreslumat@uaz.edu.mx), [rpa@uaem.mx](mailto:rpa@uaem.mx), [carlos.cabreraperdomo@uaz.edu.mx](mailto:carlos.cabreraperdomo@uaz.edu.mx)

La interfaz entre dos dominios con diferentes números de Chern permite la existencia de estados energéticos ro-bustos. Estos estados son inmunes a impurezas o perturbaciones geométricas, lo que representa un mecanismo de confinamiento topológico. El presente trabajo se enfoca en sistemas de puntos cuánticos de grafeno bicapa con signo de masa variable. En particular, empleamos potenciales de confinamiento con simetría circular y alineación de bandas invertida. La geometría de la interfaz del potencial está dada por la forma de las compuertas de voltaje utilizadas para abrir la brecha de energía. Dentro de un modelo efectivo a dos bandas, presentamos expresiones analíticas para los autoestados de portadores confinados en puntos cuánticos de grafeno bicapa. Los cálculos se realizaron en el contexto de un modelo continuo, resolviendo la ecuación de autovalores para el hamiltoniano efectivo y una geometría de pared de dominio circular. Nuestro modelo a dos bandas proporciona información sobre el espectro de energía de los puntos cuánticos basados en bicapa grafeno y logra atrapar la física fundamental de estos sistemas. Para puntos cuánticos de forma circular, se reportan expresiones analíticas dependientes del grado de libertad de valle para los pseudoespinores autoestados del Hamiltoniano efectivo a bajas energías de la bicapa de grafeno [2]. Nuestros resultados demuestran que mediante la manipulación de la pared de dominio, emergen estados de borde dentro del *gap* localizados en la frontera del punto. Además, se obtienen estados de energía cero doblemente degenerados, sin tener en cuenta los espines, para valores específicos de la altura del potencial en los dos dominios y el radio del punto. También, se reporta la relación de dispersión entre energía y momento angular para excitaciones dentro del *gap*. El control topológico y de valle del sistema muestra su potencial aplicabilidad en dispositivos valletrónicos.

### AGRADECIMIENTOS

J.F.T.G agradece a SECIHTI por la beca de investigación doctoral.

- [1] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs, Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 405 (1982).
- [2] E. McCann and M. Koshino, The electronic properties of bilayer graphene, *Reports on Progress in Physics* **76**, 056503 (2013).

## **Efectos de la alta presión sobre la estructura y propiedades electrónicas del cúmulo Au<sub>20</sub>: un estudio mediante DFT.**

Halis Y. Seuret<sup>1</sup>, Cercis Morera Boado<sup>2</sup>, Rolando Pérez Álvarez<sup>3</sup>

<sup>1</sup> *PrepaTec Campus Cuernavaca, Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey*

<sup>2</sup> *Departamento de Físicoquímica Teórica, Secihti-Centro de Investigaciones Químicas, IICBA, Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Cuernavaca, 62209, Morelos, México.*

<sup>3</sup> *Centro de Investigación en Ciencias (CInC) - Universidad Autónoma del Estado de Morelos*

*Correo electrónico: halisseureth@gmail.com*

La aplicación de alta presión constituye una estrategia fundamental para modificar las propiedades estructurales y electrónicas de los materiales, permitiendo la aparición de fenómenos emergentes y nuevas fases de la materia. En este contexto, los cúmulos metálicos de oro representan sistemas de gran interés debido a sus propiedades electrónicas, ópticas y catalíticas, las cuales dependen fuertemente de su tamaño, geometría y entorno químico. Sin embargo, el comportamiento de estos sistemas bajo condiciones extremas de presión permanece relativamente inexplorado.

En este trabajo se investigan los efectos de la compresión sobre el cúmulo Au<sub>20</sub> con simetría tetraédrica (Td) mediante cálculos de Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT) implementados en el código SIESTA. Se empleó el funcional de intercambio-correlación PBE dentro de la aproximación GGA, una base triple-zeta polarizada (TZP), pseudopotenciales normoconservativos escalares-relativistas y una energía de corte de malla de 350 Ry. Para describir adecuadamente las interacciones dispersivas y los efectos aurofílicos característicos del oro, se incorporó la corrección DFT-D3 con amortiguamiento de Becke–Johnson.

Inicialmente se realizaron cálculos autoconsistentes (SCF) sobre estructuras comprimidas isotrópicamente entre un 2 y un 10 %. Posteriormente, se implementó una metodología de confinamiento espacial mediante la reducción isotrópica de la supercelda cúbica que contiene al cúmulo, disminuyendo el parámetro de red desde 10 hasta 5 Å. Para cada condición se llevaron a cabo optimizaciones geométricas utilizando el algoritmo de gradiente conjugado, con un criterio de convergencia de fuerzas de 0.02 eV/Å y manteniendo fija la celda de simulación (VariableCell = false). Este procedimiento generó presiones efectivas estimadas entre aproximadamente 0.92 y 640 GPa.

Los resultados preliminares muestran modificaciones significativas en la estructura geométrica del cúmulo conforme aumenta la compresión, particularmente cuando las dimensiones de la supercelda se aproximan al tamaño característico del sistema. Asimismo, se observaron variaciones en las propiedades electrónicas mediante el análisis de la densidad de estados proyectada (pDOS) y de la energía de separación HOMO–LUMO. Estos resultados aportan información sobre la respuesta estructural y electrónica de nanocúmulos metálicos sometidos a condiciones extremas de presión y constituyen una base para futuras investigaciones sobre estabilidad estructural y transiciones inducidas por compresión.

## **Propiedades Termoeléctricas en Bicapa de Grafeno con Superredes de Potencial No Convencional**

L. B. Martínez-Ytuza<sup>1</sup>, J. A. Briones-Torres<sup>2</sup>, Dr. 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.*

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

Correo electrónico: [luis\\_bertin.martinez.ytuza@uaz.edu.mx](mailto:luis_bertin.martinez.ytuza@uaz.edu.mx)

La búsqueda de materiales termoeléctricos eficientes representa un gran desafío debido a la estrecha correlación entre el coeficiente Seebeck, la conductividad eléctrica y la conductividad térmica. Recientemente, la nanoestructuración y el uso de sistemas de baja dimensionalidad han surgido como estrategias clave para superar estas limitaciones.

En este contexto, la optimización de las propiedades termoeléctricas en la bicapa de grafeno ha cobrado gran relevancia, particularmente mediante el diseño de superredes para modificar el transporte electrónico. Sin embargo, las configuraciones convencionales suelen presentar oscilaciones indeseadas en las regiones de transmisión y carecen de un control preciso sobre la función de transporte.

Para resolver estos problemas, este trabajo propone el uso de superredes con perfiles de potencial no convencionales basados en modulaciones gaussianas. El objetivo es aproximar funciones de transmisión tipo “boxcar” [1], reconocidas como óptimas para maximizar la eficiencia termoeléctrica a potencia finita. La investigación emplea el método de matriz híbrida aplicado a modelos efectivos de la bicapa de grafeno para analizar el transporte electrónico. Los resultados demuestran que la modulación del band gap en las regiones de barrera suprime eficazmente las resonancias Fano/Breit-Wigner y reduce las oscilaciones remanentes en las pass bands. Esto genera regiones de transmisión más planas y cercanas al comportamiento ideal “boxcar”, lo que se traduce en mejoras significativas del coeficiente Seebeck y del factor de potencia. Estos hallazgos sugieren que el uso de superredes gaussianas en la bicapa de grafeno es una estrategia prometedora para el desarrollo de dispositivos termoeléctricos de alta eficiencia.

### **Agradecimientos**

L. B. Martínez-Ytuza agradece a SECIHTI por el soporte económico brindado, a la Universidad Autónoma de Zacatecas que me acogió durante toda mi carrera profesional, especialmente a la Unidad Académica de Ciencia y Tecnología de la Luz y la Materia.

[1] Robert S Whitney. Most efficient quantum thermoelectric at finite power output. En: Physical review letters 112.13 (2014), pág. 130601.

# Hyperbolic Plasmon dispersion and Optical Conductivity of Holey Graphene: signatures of flat-bands

Abdiel de Jesús Espinosa Champo<sup>1</sup>, Gerardo García Naumis<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Posgrado de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México, Apartado Postal 20-364 01000, Ciudad de México, México.*

<sup>2</sup>*Depto. de Sistemas Complejos, Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM). Apdo. Postal 20-364, 01000, CDMX, Mexico.*

Correo electrónico: [abdielespinosa@estudiantes.fisica.unam.mx](mailto:abdielespinosa@estudiantes.fisica.unam.mx)

Holey graphene (HG) is a two-dimensional (2D) material that has attracted considerable attention due to its electrical, thermal, and mechanical properties. The recent discovery of flat bands in HG has garnered significant interest. In this work, we systematically investigate the tunable plasmonic modes and optical conductivity of HG at or near the flat band condition by changing the holes radii and periodic configuration. It is found that HG presents nearly flat plasmonic bands in configurations with larger hole radii. Hyperbolic plasmons are found due to the breaking of the graphene's bipartite sublattice symmetry induced by the holes. Such an effect is also confirmed by looking at the optical conductivity that also presents a marked anisotropy. The material's marked optical anisotropy leads to hyperbolic plasmons, making it a promising platform for nanophotonic applications[1,2].

## Agradecimientos

AJEC and GGN thanks the CONAHCyT fellowship (No. CVU 1007044) and the Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) for providing financial support (UNAM DGAPA PAPIIT IN101924 and CONAHCyT project 1564464). The authors acknowledge and express gratitude to Ramón Carrillo-Bastos for enlightening discussions on the hyperbolic plasmons phenomena in 2D materials. We also thanks Carlos Ernesto López Natarén from Secretaria Técnica de Cómputo y Telecomunicaciones for his valuable support to implement high-performance numerical calculations.

[1] Espinosa-Champo, A. de J., & Naumis, G. G. (2026). Hyperbolic plasmon dispersion and optical conductivity of holey graphene: Signatures of flat-bands. *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*, 176, 116402. doi:10.1016/j.physe.2025.116402

[2] de Jesús Espinosa-Champo, A., & Naumis, G. G. (2024). Flat bands without twists: periodic holey graphene. *Journal of Physics: Condensed Matter*, 36(27), 275703. doi:10.1088/1361-648X/ad39be

# Aplicación de aprendizaje automático para la clasificación del desempeño de baterías de iones de litio a partir de la eficiencia coulombica y la conductividad del electrolito

Sergio Rubén Ocampo Pérez<sup>1</sup>, Outmane Oubram<sup>1</sup>, Noureddine Lakouari<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Maestría en Optimización y

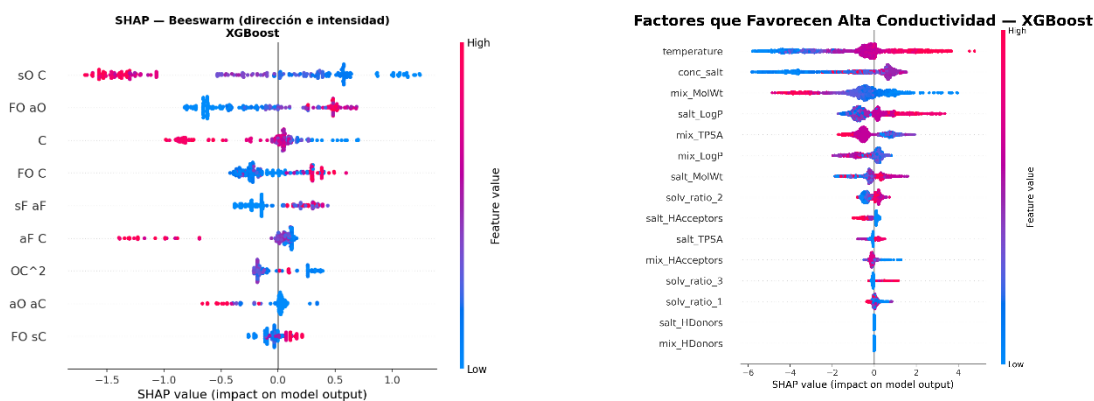
Cómputo Aplicado, Cuernavaca, Morelos, México

<sup>2</sup>Instituto Nacional de Astrofísica, Óptica y Electrónica (INAOE), Puebla 72840, México

Correo electrónico: sergioyasocia2@gmail.com

Este trabajo propone una metodología basada en aprendizaje automático para la clasificación de la eficiencia coulombica y la conductividad iónica, indicadores clave del desempeño de electrolitos utilizados en baterías de iones de litio. A partir de bases de datos experimentales reportadas en la literatura, se desarrolló un proceso de curación que incluyó la identificación de compuestos mediante el sistema SMILES y el cálculo de propiedades fisicoquímicas. Se generaron 13 descriptores de composición atómica para la eficiencia coulombica y 17 descriptores para la conductividad iónica.

Tras seleccionar las características más relevantes mediante regresión LASSO, se entrenaron y evaluaron modelos de clasificación multiclase y binaria, incluyendo Regresión Logística, K-Nearest Neighbors, Random Forest, XGBoost y LightGBM, optimizados mediante validación cruzada y Optuna. Para comprender el mecanismo algorítmico detrás de las predicciones, se empleó la técnica de interpretabilidad SHAP. Los resultados destacan que los modelos de ensamble como XGBoost superan con creces a los modelos lineales tradicionales, permitiendo detectar con alta precisión electrolitos de alto desempeño (ej. eficiencia coulombica  $\geq 99\%$ ), lo cual sienta las bases para el diseño computacional de nuevos materiales reduciendo el método de ensayo y error experimental.



## **Predicción del Transporte Electrónico en Superredes de Grafeno mediante Técnicas de Aprendizaje Automático**

Gerardo Valdez Martínez, Outmane Oubram, Mohammed Miniya  
Maestría en Optimización y Cómputo Aplicado

El grafeno es un material bidimensional con propiedades electrónicas excepcionales que lo convierten en un candidato prometedor para aplicaciones en nanoelectrónica. Sin embargo, el análisis del transporte electrónico en superredes de grafeno mediante métodos físicos tradicionales implica un elevado costo computacional.

En este trabajo se propone un modelo de aprendizaje automático basado en redes neuronales multicapa (MLP) para predecir el comportamiento del transporte electrónico a partir de parámetros geométricos y potenciales asociados a la estructura del sistema.

La base de datos fue generada mediante simulaciones numérica, considerando parámetros estructurales de entrada relacionadas con la geometría y las barreras electrónicas. Posteriormente, se realizó el preprocesamiento, normalización y división de los datos para el entrenamiento y evaluación del modelo.

La arquitectura final seleccionada estuvo compuesta por tres capas ocultas de 65, 110 y 65 neuronas, utilizando la función de activación ReLU y el optimizador Adam. Los resultados obtenidos mostraron una alta capacidad predictiva, alcanzando un coeficiente de determinación  $R^2 = 0.965845$ , un  $MSE = 0.035361$  y un  $MAE = 0.129208$ , demostrando la capacidad del modelo para capturar las relaciones no lineales entre los parámetros estructurales y el transporte electrónico en superredes de grafeno.

Los resultados indican que las técnicas de aprendizaje automático constituyen una alternativa eficiente para acelerar el análisis del transporte electrónico en superredes de grafeno, reduciendo significativamente el costo computacional respecto a los métodos tradicionales y manteniendo una elevada capacidad predictiva.

## **Propiedades vibracionales de nanoalambres de InAs: un estudio semiempírico usando DFTB**

A. Barranco<sup>1</sup>, J. Galván<sup>1</sup>, J. L. Cuevas, M. Ojeda<sup>2</sup>, A. Trejo<sup>1</sup>, F. Salazar<sup>1</sup>, A. Miranda<sup>1</sup>, M. Cruz-Irisson<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacan, Av. Santa Ana 1000 San Francisco Culhuacan, 04440 CDMX, México*

<sup>2</sup>*Universidad de Guadalajara, Centro de Investigación en Nanociencia y Nanotecnología de CUValles, Depto. de Ciencias Naturales y Exactas, Ameca Jalisco 46600, México*  
Correo electrónico: abarrancos2101@ipn.mx

Los nanoalambres semiconductores se han convertido en una de las nanoestructuras más importantes en el desarrollo de tecnologías como la optoelectrónica, el almacenamiento de energía, las comunicaciones y la computación cuántica, entre otras. Los nanoalambres semiconductores de materiales binarios como GaAs, InP han sido sintetizados y estudiados con especial interés debido a las posibilidades que ofrece una superficie con dos tipos de átomos, y las propiedades que presentan estos respecto a sus contrapartes en bulto. En particular los nanoalambres de InAs son atractivos debido a la gran movilidad electrónica del InAs, sin embargo, no se ha estudiado de manera detallada sus propiedades vibracionales, para posibles aplicaciones térmicas y características como espectro IR. En este trabajo se estudiaron las propiedades vibracionales y electrónicas de nanoalambres de InAs mediante el método de amarre fuerte basado en la teoría de funcionales de la densidad (DFTB) y el método de superceldas [1], en el que los alambres se modelan eliminando los átomos exteriores a una circunferencia en la dirección [111] de un cristal perfecto de InAs. Los resultados muestran que los nanoalambres son estables dinámicamente dado que las estructuras de bandas de fonones son positivas; igualmente, se observa un desplazamiento de los modos ópticos de más alta frecuencia del InAs hacia frecuencias menores debido a efectos del confinamiento de fonones. De igual forma, se observa que el calor específico presenta un comportamiento lineal a temperaturas bajas, acercándose gradualmente a un comportamiento cúbico, el cual no se alcanza incluso con diámetros de 2.9 nm. La brecha prohibida de energía cambia a indirecta en los diámetros más bajos y se convierte a directa a partir del diámetro de 1 nm. Estos resultados podrían ser de gran utilidad para la caracterización y la ingeniería de las propiedades de estos nanoalambres.

### **Agradecimientos**

Este trabajo fue financiado por proyectos multidisciplinarios e individuales de la SIP-IPN

[1] J. A. Moreno-Banda, F. Salazar, A. Trejo, A. Miranda, R. Oviedo-Roa, L. A. Pérez, M. Cruz-Irisson, DFT insights into the electromechanical properties of Li-passivated Ge nanowires for energy storage, *Surfaces and Interfaces* **76**, 107856 (2025)

## **Reconocimiento automático de la Lengua de Señas Mexicana (LSM) en contextos clínicos mediante visión computacional con arquitecturas Vision Transformer**

Juan Pablo Robles Torres<sup>1</sup>, Dr. Outmane Oubram<sup>2</sup>, Dr. Mario Limón Mendoza<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Maestría en Optimización y Cómputo Aplicado (MOCA), Universidad Autónoma del Estado de Morelos*

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

Correo electrónico: [juan.robles@uaem.mx](mailto:juan.robles@uaem.mx)

La comunicación entre personas sordas y profesionales de la salud representa un desafío importante debido a la limitada disponibilidad de intérpretes de Lengua de Señas Mexicana (LSM) en hospitales y centros de atención médica. Esta situación puede generar dificultades durante la identificación de síntomas, la explicación de diagnósticos y la comprensión de tratamientos. Ante esta problemática, este trabajo propone el desarrollo de un sistema de reconocimiento automático de señas médicas de la LSM mediante visión computacional y arquitecturas Vision Transformer (ViT). La investigación contempla la construcción de un conjunto de datos especializado compuesto por aproximadamente 95 señas relacionadas con síntomas, enfermedades, procedimientos clínicos, personal médico y espacios hospitalarios. Para ello se diseñó un protocolo de grabación, consentimiento informado y etiquetado que permite obtener muestras de video validadas por usuarios competentes en LSM. Actualmente se han realizado múltiples sesiones de grabación con participantes de la comunidad sorda, alcanzando más de 1300 videos organizados y etiquetados automáticamente. La metodología integra la adquisición de videos RGB, el procesamiento visual mediante técnicas de visión computacional y el entrenamiento de modelos basados en Vision Transformer, considerando además aprendizaje por transferencia a partir de conjuntos de datos de lenguas de señas disponibles públicamente. Se espera que los resultados contribuyan al desarrollo de herramientas tecnológicas que favorezcan la accesibilidad e inclusión de las personas sordas en entornos clínicos, facilitando la comunicación entre pacientes y personal médico mediante soluciones basadas en inteligencia artificial [1].

### **Agradecimientos**

A la Universidad Autónoma del Estado de Morelos, a la Maestría en Optimización y Cómputo Aplicado (MOCA), al Dr. Outmane Oubram y a las personas de la comunidad sorda que colaboran en la construcción del conjunto de datos.

[1] J. P. Robles Torres y O. Oubram, Reconocimiento automático de la Lengua de Señas Mexicana en contextos clínicos mediante arquitecturas Vision Transformer, Trabajo de investigación, UAEM, 2026.

## **Enfoque de enlace fuerte para la formación de minibandas en superredes de pozos cuánticos de perovskita**

I. J. Valdez-Saucedo<sup>1</sup>, C. I. Cabrera-Perdomo<sup>1</sup>, R. A. Reyes-Villagrana<sup>1,2</sup>

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

<sup>2</sup> *IxM de la SECIHTI, Av. Insurgentes Sur #1582, Col. Crédito Constructor, Alcaldía Benito Juárez, C. P. 03940, Cd. de México.*

Correo electrónico: ivaldezmat@uaz.edu.mx

Desde hace varias décadas se ha incrementado el estudio de estructuras cuánticas para el desarrollo de celdas fotovoltaicas, proponiendo diferentes materiales y configuraciones. Recientemente se ha explorado a la perovskita, cuyas propiedades intrínsecas la posicionan como un material viable para celdas solares de cuarta generación. En este trabajo se presenta un enfoque Tigth-Binding (TB) generalizado para la formación de minibandas en una superred de pozos cuánticos (QW) de perovskita. El modelo TB se extiende al considerar que los QW juegan el rol de átomos. La estructura consiste en una superred de pozos cuánticos de perovskita (CsPbBr<sub>3</sub>) y material de barrera 1,3,5-tris(N-phenyl-benzimidazol-2-yl) benzene (TPBi). Primeramente, se calculan los estados electrónicos de un pozo cuántico aislado. Con el enfoque TB se calculan los estados electrónicos de la superred de QWs considerando el acoplamiento cuántico entre pozos cercanos. El alineamiento entre bandas es de tipo-I. Se reporta el comportamiento de los anchos de minibandas en función del ancho de las regiones de barrera y pozo. Se obtienen anchos de minibandas, formadas a partir de estados localizados en los QW de hasta 50 meV de ancho; esto ocurre para los estados más energéticos en el QW. Se concluye que es viable la formación de minibandas en superredes de perovskitas lo que mejoraría la absorción de luz y el desempeño de una celda solar fotovoltaica.

### **Agradecimientos**

R. A. R. V. agradece a la SECIHTI por el apoyo otorgado para el desarrollo de este trabajo.

## **Impacto de los esquemas de corrección DFT-1/2 y shDFT-1/2 en la configuración electrónica y propiedades ópticas de las fases monoclinicas de Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub> y Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>.**

Gerardo Jafet González-Loera<sup>1,3</sup>, K. A. Rodríguez-Magdaleno<sup>2,3</sup>, F. M. Nava-Maldonado<sup>3</sup>, M. E. Mora-Ramos<sup>4</sup>, J. C. Martínez-Orozco<sup>1</sup> <sup>1</sup>Universidad Autónoma de Zacatecas. Unidad Académica de Física, México.

<sup>2</sup>Universidad Autónoma de Zacatecas, Laboratorio de Ciencias Forenses, Unidad Académica de Derecho, México.

<sup>3</sup>Universidad Autónoma de Zacatecas, Unidad Académica de Ciencias Químicas, México.

<sup>4</sup>Universidad Autónoma del Estado de Morelos, Centro de Investigación en Ciencias, Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas, México.

Correo electrónico: gerardojafet.gonzalez@fisica.uaz.edu.mx

En años recientes, los materiales de brecha ultraancha (ultra-wide bandgap) han cobrado una relevancia significativa debido a su alto potencial en aplicaciones optoelectrónicas, dispositivos de radiación ultravioleta y electrónica de potencia. Dentro de este ámbito, el óxido de galio (Ga<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) y el óxido de aluminio (Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>) emergen como sistemas de particular interés, dada la versatilidad de sus propiedades electrónicas y ópticas. En el presente trabajo, se analizó la estructura electrónica de ambos óxidos en su fase monoclinica (C2/m) mediante la Teoría Funcional de la Densidad (DFT), evaluando comparativamente los esquemas GGA-PBE, DFT-1/2 y shDFT-1/2. A partir de estos métodos, se determinó la estructura de bandas, la densidad de estados (DOS), el coeficiente de absorción y el índice de refracción. Los hallazgos indican que la incorporación de correcciones tipo 1/2 en los pseudopotenciales incrementa significativamente el gap energético en comparación con el esquema GGA-PBE, lo que conlleva una modificación sustancial en la respuesta óptica calculada para ambos sistemas. En conclusión, estos resultados evidencian la necesidad de implementar correcciones que trasciendan la aproximación GGA-PBE para lograr una descripción más precisa de las propiedades electrónicas y ópticas de los óxidos de brecha ultraancha con relevancia tecnológica.

### **Agradecimientos**

A la Secretaría de Ciencia, Humanidades, Tecnología e Innovación por el apoyo brindado.

## **Modulación de las propiedades optoelectrónicas en bicapas de GaAs con apilamiento AA1 mediante dopaje con Ge**

Julio César Reyes de León<sup>1</sup>, Gerardo Jafet González Loera<sup>1</sup>, Karla Arely Rodríguez Magdaleno<sup>1,2</sup>, Faustino Aguilera Granja<sup>3</sup>, Flavio Manuel Nava Maldonado<sup>4</sup>, Juan Carlos Martínez Orozco<sup>1</sup>

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

<sup>2</sup>*Laboratorio de Ciencias Forenses, Unidad Académica de Derecho, Universidad Autónoma de Zacatecas, Ramón López Velarde 117, Lomas del Patrocinio, 98068, Zac., Zacatecas, México.*

<sup>3</sup>*Instituto de Física, Universidad Autónoma de San Luis Potosí, Av. Parque Chapultepec 1570, Privadas del Pedregal, C.P. 78295 San Luis Potosí, México.*

<sup>4</sup>*Unidad Académica de Ciencias Químicas Universidad Autónoma de Zacatecas, Campus Universitario UAZ Siglo XXI Carretera Zacatecas-Guadalajara Km. 6, Ejido La Escondida, C.P. 98160, Zac., Zacatecas, México.*

Correo electrónico:

julio.780850@fisica.uaz.edu.mx

En este trabajo, investigamos las propiedades electrónicas y ópticas de una bicapa de GaAs con una configuración de apilamiento AA1, la cual representa la variante más simple entre las múltiples opciones posibles de apilamiento en estos sistemas. El estudio se centra en el dopaje con Ge tanto en estructuras de bicapas como de monocapas, motivado por el hecho de que los átomos de germanio mejoran significativamente las propiedades ópticas del GaAs. En este modelo, se considera que los átomos de germanio sustituyen ya sea a los átomos de Ga (actuando como impurezas de tipo n) o a los átomos de As (exhibiendo un comportamiento de tipo p). El análisis se lleva a cabo dentro del marco de la Teoría de la Funcional de la Densidad (DFT), donde la estructura electrónica se examina a través de cálculos de estructura de bandas y la densidad de estados (DOS), mientras que las propiedades ópticas se obtienen a partir de la parte imaginaria de la función dieléctrica. Finalmente, reportamos las propiedades electrónicas y ópticas resultantes bajo varias configuraciones de dopaje, incorporando los efectos de la polarización de espín y la presencia de campos eléctricos externos.

## **Estudio de la bianisotropía en metamateriales: representación de Haydock del operador maxwelliano**

Eduardo Enrique Viveros Armas<sup>1</sup>, Wolf Luis Mochán Backal<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Ciencias Físicas, Universidad Nacional Autónoma de México*

Correo electrónico: viveros@icf.unam.mx

Los metamateriales son sistemas artificiales cuyas propiedades macroscópicas emergen tanto de la arquitectura geométrica de sus constituyentes como de sus propiedades intrínsecas individuales. La respuesta óptica macroscópica de un metamaterial periódico, en el régimen donde la longitud de onda es comparable con el parámetro de red, puede presentar bianisotropía, fenómeno derivado del acoplamiento entre las respuestas eléctrica y magnética.

En este trabajo, se propone el estudio de dicha respuesta mediante la representación de Haydock. A diferencia de implementaciones previas basadas en el operador de onda (un operador diferencial de segundo orden), este enfoque utiliza el operador maxwelliano, un operador de primer orden que actúa sobre un vector de seis componentes (campos eléctrico y magnético acoplados), que permite incorporar la bianisotropía de manera natural.

Como primer sistema de estudio se plantea un arreglo periódico multicapa dieléctrico-metálico, de manera que se puede abordar como unidimensional en la dirección de variación periódica y restringir la dirección de un campo eléctrico y magnético incidentes como perpendiculares a la dirección de variación espacial, simplificando las expresiones a calcular. Se compara la respuesta bianisótropa obtenida mediante este formalismo con la obtenida a partir de la no localidad de la permitividad macroscópica.

### **Agradecimientos**

Investigación realizada gracias al apoyo recibido por parte del Programa de Apoyo a Proyectos de Investigación e Innovación Tecnológica (DGAPA-PAPIIT) de la UNAM, proyecto IN117925.

## **Sobre procedimientos algebraicos para la simplificación a modos particulares de las ecuaciones de movimiento para ondas en materiales de interés.**

G. Laffit N. Estrada<sup>1</sup>, Rolando Pérez-Álvarez<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto de Investigación en Ciencias Básicas y Aplicadas (IICBA) de la UAEM*

<sup>2</sup>*Centro de Investigación en Ciencias (CInC) de la UAEM*

Correo electrónico:

[gustavo.navarroest@uaem.edu.mx](mailto:gustavo.navarroest@uaem.edu.mx), [rpa@uaem.mx](mailto:rpa@uaem.mx)

El estudio de las ecuación diferenciales parciales que describen las oscilaciones presentes en materiales como los piezoeléctricos conlleva tener presentes muchas consideraciones de nomenclatura y convenios, sin embargo, en el presente trabajo se discute un detalle sutil en el procedimiento para la simplificación de éstas al momento de trabajar en modos de interés.

Resulta que la simplificación algebraica para trabajar con modos particulares consiste en hacer alguna de las componentes de las oscilaciones nulas, sin embargo en este trabajo se cuestiona si ese procedimiento es equivalente a reducir el número de ecuaciones para que coincida con el número de incógnitas del sistema.

### **Agradecimientos**

Al Taller de Física de la Materia Condensada y Molecular, al IICBA y al CInC de la UAEM, a la SECIHTI, así como a todas y todos los estudiantes de la Resistencia que han luchado y luchan por una Universidad más segura para todxs.

# Topological features in a single-layer graphene obtained through a numerical simulation beyond the Dirac approximation

José Carlos Rebón <sup>1</sup>, Fabrizio García-Marín <sup>1</sup>, Francisco Delgado <sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Tecnologico de Monterrey, School of Engineering and Sciences*

E-mail: [a00374578@tec.mx](mailto:a00374578@tec.mx)

Topologically ordered systems have attracted significant interest due to their possible applications in topological quantum computation, where quantum information is stored non-locally and therefore acquires robustness against local decoherence mechanisms, allowing the emergence of anionic excitations. In this context, the calculation and analysis of wavefunctions become valuable in understanding the underlying physics associated with these unconventional quantum states. Among the materials currently studied, graphene has received particular attention due to its simple structure together with its broad range of mechanical, electrical and optical properties. In quantum mechanics, both analytical and numerical approaches combined with proper boundary conditions have contributed to the understanding of electron transport through graphene lattices, especially in connection with quantum Hall phenomena and their topological characteristics. In addition, vortex structures arising in current-density simulations may be interpreted as signatures related to anyonic quasiparticle behavior in topologically ordered regimes. In this work, we present a numerical approach for the calculation of graphene wavefunctions within the tight-binding approximation but beyond the vicinity of the Dirac points. The proposed method also allows the analysis of vortex structures in the probability current distribution as possible indicators of anyonic behavior. Finally, we discuss possible extensions involving periodic boundary conditions and alternative lattice configurations for future large-scale numerical studies of graphene-based systems [1-4].

## Acknowledgements

The authors acknowledge the financial support of Tecnológico de Monterrey in the production of this work. J.C.R. and F.G.M. also acknowledge SECIHTI for its economic support.

- [1] García-Marín, F., Rebón, J.C., Delgado, F. A numerical procedure to obtain the time-dependent spinorial wavefunction on a graphene lattice, In press, 2026.
- [2] Díaz-Bautista, E. and Negro, J. and Nieto, L. M. Coherent states in the symmetric gauge for graphene under a constant perpendicular magnetic field, *The European Physical Journal Plus* (136) 5, 2021.
- [3] Semenoff, G. Condensed-Matter Simulation of a Three-Dimensional Anomaly, *Physical Review Letters*, (53) 26, 1984.
- [4] Oliva-Leyva, M. Hamiltoniano efectivo de Dirac para el grafeno deformado: propiedades electrónicas y ópticas, *Disertación, Universidad Nacional Autónoma de México*, 2016.

## Estudio DFT de nanoalambres de [111]-SiC con Na superficial para material anódico

Mario Gonzalez Perez<sup>1</sup>, Alejandro Trejo<sup>1</sup>, Fernando Salazar<sup>1</sup>, Miguel Cruz-Irisson<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Politécnico Nacional*  
Correo electrónico: marioglzprz@esimez.mx

Los nanoalambres de carburo de silicio (SiCNW) han atraído una atención significativa como materiales de ánodo potenciales para baterías recargables de próxima generación debido a su alta estabilidad química y gran capacidad de almacenamiento de energía [1]. Los SiCNW combinan las propiedades excepcionales del SiC masivo, como la resistencia mecánica, con las ventajas únicas de las nanoestructuras unidimensionales, incluyendo una alta relación superficie-volumen. En este trabajo, presentamos un estudio DFT de las propiedades electrónicas y mecánicas de 3C-SiCNW pasivados con hidrógeno, orientados a lo largo de la dirección cristalográfica [111] y funcionalizados con átomos de Na. El modelo considera la sustitución secuencial del hidrógeno unido a átomos de carbono superficiales por átomos de sodio. Nuestros resultados revelan que, para las concentraciones más altas de átomos de Na, los sistemas transitan de un comportamiento semiconductor a uno metálico. Los cálculos de energía de formación muestran que todas las configuraciones estudiadas son energéticamente favorables, con una estabilidad mejorada a diámetros mayores y concentraciones de Na más altas. La energía de enlace promedio por átomo de Na permanece constante en concentraciones alrededor de 1 eV. Sorprendentemente, la capacidad máxima de almacenamiento teórica alcanza los 485 mAh/g, superando la del grafito (372 mAh/g), comúnmente utilizado en baterías comerciales. El voltaje de circuito abierto se mantiene constante en torno a 1 V, lo que indica una buena estabilidad de voltaje. Además, los valores del módulo de Young superan los 200 GPa para todos los sistemas estudiados, lo que demuestra una excelente resistencia mecánica e integridad estructural tras la funcionalización con sodio. Estos hallazgos resaltan el prometedor potencial de los nanoalambres de SiC [111] modificados superficialmente con sodio como materiales de ánodo de alta capacidad y robustez mecánica para baterías recargables avanzadas.

### Agradecimientos

M.G.P. agradece al IPN, SECIHTI y BEIFI-IPN por su apoyo financiero.

[1] D. Sri Maha Vishnu, J. Sure, H. K. Kim, R. V. Kumar, and C. Schwandt, “Solid state electrochemically synthesised  $\beta$ -SiC nanowires as the anode material in lithium ion batteries,” *Energy Storage Mater*, vol. 26, pp. 234–241, Apr. 2020, doi: 10.1016/j.ensm.2019.12.041.

## Adsorción y detección de monóxido de carbono en siligeno prístino: un estudio de primeros principios

Alejandro Barranco-Sainz<sup>1\*</sup>, Ranferi C. Betancourt<sup>1,2</sup>, Álvaro Miranda<sup>1</sup>, Miguel Cruz-Irisson<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Politécnico Nacional, ESIME-Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, C.P. 04440, Ciudad de México, México*

<sup>2</sup>*Department of Engineering Science, The University of Electro-Communications (UEC), Tokyo, Japan.*

\*Correo electrónico: [abarrancos2101@alumno.ipn.mx](mailto:abarrancos2101@alumno.ipn.mx)

El monóxido de carbono (CO) es un gas altamente tóxico cuya detección rápida y eficiente continúa siendo un desafío tecnológico. En este trabajo se realizaron cálculos de primeros principios basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) para investigar la adsorción de CO sobre siligeno prístino (2D-SiGe), un material bidimensional con potencial para aplicaciones de sensado. Los resultados muestran que la configuración más estable ocurre cuando el átomo de carbono de la molécula de CO interactúa con la superficie de 2D-SiGe. Se observaron interacciones de fisisorción con distancias de adsorción entre 1.86 y 3.87 Å, indicando una interacción energéticamente favorable entre el gas y el material. El análisis de las propiedades electrónicas reveló que todos los sistemas CO-2D-SiGe conservan un comportamiento metálico. Asimismo, la adsorción de CO induce modificaciones en la función de trabajo de la superficie, alcanzando un cambio máximo de -0.09 eV para la configuración más estable. Los tiempos de recuperación estimados se encuentran entre 0.1 y 2.7 ns a 298 K, lo que sugiere una rápida reutilización del sensor. Adicionalmente, simulaciones de dinámica molecular ab initio confirmaron la estabilidad del sistema adsorbido. Estos resultados indican que el siligeno prístino es un candidato prometedor para la detección de CO debido a su estabilidad, sensibilidad electrónica y rápidos tiempos de recuperación [1,2].

### Agradecimientos

Este trabajo fue financiado por los proyectos multidisciplinarios 2026-0025 y 2026-0031 de la SIP-IPN. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de la DGTIC-UNAM (proyecto LANCAD-UNAM-DGTIC-180). A.B.S. y R.C.B. agradecen a SECIHTI y BEIFI-IPN por el apoyo financiero otorgado.

- [1] R. C. Betancourt, L. G. Arellano, A. Trejo, Á. Miranda, C. Ramírez, L. A. Pérez, J. Nakamura, and M. Cruz-Irisson, DFT study of CO and O<sub>2</sub> capture on silicon carbide monolayers decorated with alkali-metal atoms, *Jpn. J. Appl. Phys.* 64, 11SP01 (2025).
- [2] D. Romero-Palacios, M. Gonzalez, F. De Santiago, Á. Miranda, F. Salazar, I. J. Hernández-Hernández, L. A. Pérez, and M. Cruz-Irisson, Ab initio study of alkali-metal-decorated silicene for acetone sensing and trapping as a diabetes biomarker, *Appl. Surf. Sci.* 730, 166318 (2026).

## Difusión de Litio en nanoalambres de Carburo de Silicio pasivados con Hidrogeno

Dafne D. Barranco<sup>1</sup>, Fernando Salazar Posadas<sup>1</sup>, Miguel Cruz-Irisson<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto Politécnico Nacional, ESIME Culhuacán, Av. Santa Ana 1000, Ciudad de México, México

Correo electrónico: dbarrancor1300@alumno.ipn.mx

Ante la creciente necesidad de desarrollar materiales anódicos con alta capacidad y estabilidad para baterías recargables de ion litio, resulta fundamental comprender los mecanismos de difusión de Li en nanoestructuras semiconductoras. En este trabajo se presenta un estudio teórico de la difusión de litio en un nanoalambre de carburo de silicio (SiC) orientado en la dirección  $\langle 100 \rangle$  y con diámetro  $w_4$ , empleando cálculos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT). Se analizaron diferentes trayectorias de migración entre sitios tetraédricos (Td) estables localizados en la superficie e interior del nanoalambre. Inicialmente, se estudió la inserción de un átomo de Li desde un sitio Td externo hacia un primer sitio Td interno (T1). Posteriormente, se evaluaron trayectorias consecutivas entre sitios Td internos adyacentes (T2, T3 y T4), permitiendo el desplazamiento progresivo del Li hacia la región central del nanoalambre. Una vez ocupada esta posición interna, se introdujo un segundo átomo de Li siguiendo una ruta similar, quedando finalmente ubicado en un sitio Td adyacente al primer átomo insertado. Finalmente, se analizó la inserción de un tercer átomo de Li mediante una trayectoria alternativa desde un sitio Td fuera del nanoalambre hacia un sitio Td interno.

Los resultados muestran que para el primer átomo de Li las barreras de difusión asociadas a las trayectorias T1, T2, T3 y T4 son de 3.410, 1.668, 0.786 y 1.668 eV, respectivamente. Para la inserción del segundo átomo de Li, las barreras obtenidas para T1, T2 y T3 son de 3.170, 1.567 y 0.786 eV, respectivamente. Por su parte, la inserción del tercer átomo de Li mediante una trayectoria alternativa presenta una barrera de difusión de 2.851 eV. En general, las barreras más elevadas se observan durante el proceso de incorporación inicial desde el exterior hacia el interior del nanoalambre, mientras que la migración entre sitios Td internos requiere menores energías de activación. Estos resultados aportan información relevante sobre los mecanismos de transporte de litio en nanoalambres de SiC y contribuyen a la comprensión de su posible aplicación como material anódico en sistemas avanzados de almacenamiento de energía.

### Agradecimientos

Este trabajo es financiado por los proyectos multidisciplinarios 2025-0128 y 2025-0125 de la Secretaría de Investigación y Posgrado del IPN. Los cálculos se realizaron en la supercomputadora Miztli de DGTIC-UNAM (proyectos LANCAD-UNAM-DGTIC-180 y 381). D.D.B.R. agradece a SECIHTI (CONAHCYT) y a BEIFI-IPN por su apoyo financiero.

[1] B. Delley, "From molecules to solids with the DMol3 approach," J. Chem. Phys., vol. 113, no. 18, pp. 7756–7764, Nov. 2000, doi: 10.1063/1.1316015.

## Exploring the Photovoltaic Performance of $(\text{CdTe})_{1-x}\text{Al}_x$ Thin Films in Heterostructures with a $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$ Window Layer

J.A. Melchor-Robles<sup>1</sup>, Abhishek Chandel<sup>2</sup>, KE-Nieto Zepeda<sup>3</sup>, Tatsuya Sasaki<sup>4</sup>, Masakazu Kobayashi<sup>4</sup>,  
Miguel Melendez-Lira<sup>1</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Física, Centro de Investigación y de Estudios Avanzados del IPN, Ciudad de México, Instituto Politécnico Nacional 2508, San Pedro Zacatenco, Gustavo A. Madero, 07360, Ciudad de México, CDMX.*

<sup>2</sup>*Programa de Doctorado en Nanociencia y Nanotecnología, Centro de Investigación y Estudios Avanzados, Cinvestav, 07360, CDMX, México*

<sup>3</sup>*Escuela Superior de Ingeniería y Arquitectura Unidad Zacatenco, Instituto Politécnico Nacional (ESIAZ-IPN), Unidad Profesional Adolfo López Mateo, Av. Miguel Bernard S/N, Col. Zacatenco, Del. Gustavo A. Madero, C.P. 07738, Ciudad de México, México.*

<sup>4</sup>*Department of Electrical Engineering and Bioscience, Waseda University*

Correo electrónico: jairmelchor@gmail.com

In this work,  $(\text{CdTe})_{1-x}\text{Al}_x$  thin films were deposited by radio-frequency (RF) co-sputtering and integrated into the soda-lime glass/Mo/ $(\text{CdTe})_{1-x}\text{Al}_x/\text{ZnIn}_2\text{S}_4/\text{ZnO}$  heterostructure in order to evaluate the effect of Al incorporation on the structural, morphological, and photovoltaic properties of the resulting devices. X-ray diffraction (XRD) analysis confirmed the preservation of the cubic CdTe phase at low Al contents; however, higher concentrations induced lattice microstrain and a progressive reduction in crystallite size. Compositional analysis revealed a systematic increase in Al content with increasing power applied to the Al target, accompanied by a decrease in Cd concentration. Secondary ion mass spectrometry (SIMS) depth profiling confirmed the multilayer architecture of the device and a homogeneous Al distribution consistent with the deposition conditions. Morphological analysis showed homogeneous particle sizes in the range of 40–110 nm, with the formation of agglomerates at high Al contents. The optical bandgap ranged from 1.5 to 1.8 eV. Both the spectral response and electrical performance deteriorated with increasing Al incorporation. The highest photovoltaic efficiency (~0.1%) was obtained at low Al concentrations, indicating that excessive incorporation of this element negatively affects device performance.

### Acknowledgments

The authors acknowledge the technical support of M. Guerrero, A. García, and Z. Rivera-Alvarez, as well as the scientific advice of S. Gallardo-Hernández from the Physics Department at Cinvestav. The authors also acknowledge the financial support provided by SECIHTI (2025).

- [1] M. Becerril, O. Vigil-Galán, G. Contreras-Puente and O. Zelaya-Angel “Aluminum doping of CdTe polycrystalline films starting from the heterostructure CdTe/Al,” *Revista Mexicana de Física*, vol. 57, pp. 304–308, 2011.
- [2] M. B.-S. M. Melendez-Lira, “Semiconductor thin films grown by RF-co-sputtering of CdTe and Al targets,” *Superficies y vacío*, vol. 18, no. 3, pp. 22–26, Sep. 2005.
- [3] M. González-Alcudia y M. Zapata-Torres, “Crecimiento de películas de CdTe:Al,” *REVISTA MEXICANA DE FÍSICA*, vol. 52, no. 1, pp. 48–52, 2006.
- [4] H. Deguchi, H. Miura, K. Tsuji, and H. Yuzurihara, “ZnInS Thin Film Solar Cell Fabricated by Sputtering Process,” *Jpn. J. Appl. Phys.*, vol. 51, no. 10S, p. 10NC37, Oct. 2012, doi: 10.1143/JJAP.51.10NC37.

## Janus NbSCl: A Strain-Tunable 2D Semiconductor for Next-Generation Optoelectronics

Abhishek Chandel<sup>1</sup>, Jair Antonio Melchor Robles<sup>2</sup>, Osvaldo de Melo<sup>3</sup>, Miguel Ángel Melendez Lira<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Departamento de Nanociencia y Nanotecnología, Cinvestav, Ciudad de México, México*

<sup>2</sup>*Departamento de Física, Cinvestav, Ciudad de México, México*

<sup>3</sup>*Escuela Superior de Física y Matemáticas, Instituto Politécnico Nacional, Ciudad de Mexico, Mexico*

Correo electrónico: [chandel.abhishek@cinvestav.mx](mailto:chandel.abhishek@cinvestav.mx)

Two-dimensional Janus monolayers with broken mirror symmetry have attracted significant attention owing to their unique structural asymmetry and tunable physical properties. However, the strain-dependent behavior of novel Janus transition metal chalcogenide-halide systems remains largely unexplored. In this work, we investigate the structural, electronic, optical, and mechanical properties of the Janus NbSCl monolayer under applied strain using first-principles density functional theory (DFT), employing the SIESTA code with GGA-PBE and hybrid HSE06 functionals. Thermodynamic and dynamical stability of the monolayer are confirmed by binding energy calculations and phonon dispersion analysis, respectively. Electronic structure calculations reveal a direct band gap of 1.86 eV at the  $\Gamma$  point, with strong optical absorption spanning the visible to ultraviolet range. The monolayer demonstrates good mechanical robustness with a Young's modulus of 93.61 N/m. Most significantly, strain engineering induces a reversible indirect-to-direct band gap transition, enabling continuous band gap tunability from 0 to 1.4 eV. These results establish Janus NbSCl as a promising strain-tunable 2D semiconductor for next-generation flexible optoelectronic applications.

### Agradecimientos

The author gratefully acknowledges Dr. Arun Kumar, Department of Physics, Himachal Pradesh, India, for his valuable guidance, encouragement, and support throughout this work. The author also acknowledges the SIESTA Development Team for providing the computational package used in this study and the HONPAS High-Performance Computing facility for the computational resources. Furthermore, the author sincerely acknowledges the financial support provided by SECIHTI (2025)

### References

- [1] A.-Y. Lu, H. Zhu, J. Xiao, C.-P. Chuu, Y. Han, M.-H. Chiu, C.-C. Cheng, C.-W. Yang, K.-H. Wei, Y. Yang, Y. Wang, D. Sokaras, D. Nordlund, P. Yang, D. A. Muller, M.-Y. Chou, X. Zhang, and L.-J. Li, "Janus monolayers of transition metal dichalcogenides," *Nat. Nanotechnol.* 12, 744-749 (2017). doi:10.1038/nano.2017.100
- [2] J. M. Soler, E. Artacho, J. D. Gale, A. Garcia, J. Junquera, P. Ordejon, and D. Sanchez-Portal, "The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation," *J. Phys.: Condens. Matter* 14, 2745-2779 (2002). doi:10.1088/0953-8984/14/11/302
- [3] J. P. Perdew, K. Burke, and M. Ernzerhof, "Generalized Gradient Approximation Made Simple," *Phys. Rev. Lett.* 77, 3865-3868 (1996). doi:10.1103/PhysRevLett.77.3865
- [4] A. Devi, N. Dhiman, N. Kumar, W. Alfalasi, A. Kumar, P. K. Ahluwalia, A. Singh, and N. Tit, "Ferromagnetism in Defected TMD (MoX<sub>2</sub>, X = S, Se) Monolayer and Its Sustainability under O<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, and H<sub>2</sub>O Gas Exposure: DFT Study," *Nanomaterials* 13, 1642 (2023). doi:10.3390/nano13101642

## **Caracterización Termográfica de Hotspots en Módulos Fotovoltaicos mediante Análisis Geométrico y Térmico realizado en MATLAB**

J. I. Verdugo-Hernández, Y. Rodríguez-Lazcano, M. Miniya, A. R. Figueroa-Flores.

Unidad Académica de Ciencias Básicas e Ingeniería. Universidad Autónoma de Nayarit, Boulevard Tepic-Xalisco #325, Ciudad de la Cultura "Amado Nervo", C.P. 63155, Tepic, Nayarit, México.

Correo electrónico: [25000258@uan.edu.mx](mailto:25000258@uan.edu.mx)

En este trabajo se propone una metodología de procesamiento de imágenes termográficas realizada en MATLAB para la identificación, caracterización y clasificación de anomalías térmicas en celdas solares fotovoltaicas. El método opera en ocho etapas secuenciales que parten de la selección interactiva de regiones de interés e incluyen refinamiento por filtrado gaussiano y umbralización relativa, extracción de descriptores geométricos y térmicos; clasificación heurística de anomalías, construcción de perfiles térmicos con cálculo de ancho a media altura y representación tridimensional del campo de temperatura. La metodología genera de forma automática tablas de resultados exportables y figuras de visualización por cada hotspot. Para este trabajo se utilizaron imágenes termográficas tomadas de un sistema de celdas solares desarrollado para este estudio.

**Agradecimientos:** Los autores agradecemos a la Unidad Académica de Ciencias Básicas e Ingenierías de la Universidad Autónoma de Nayarit, así como al Centro Nayarita de Innovación y Transferencia de Tecnología por el uso de las instalaciones. J. I. V. H. agradece a la Maestría en Ciencias e Ingenierías y a la SECIHTI por la beca para estudios de posgrado.

## **Análisis del efecto ambiental del sistema interconectado nacional usando un modelo de despacho económico incorporando señales ambientales**

Jesus Adrian Diaz de la Vega Luna, Luis Cisneros Villalobos.

Universidad Autónoma del Estado de Morelos Doctorado en Ingeniería Ambiental y tecnologías  
Sustentables

Correo electrónico: Jesus.a.dvl@gmail.com

La transición hacia un sistema eléctrico sustentable requiere de herramientas analíticas que permitan evaluar el impacto real de las políticas climáticas en la operación de la red. El Despacho Económico con Restricciones de Seguridad (DERS) tradicional minimiza exclusivamente los costos de producción para cubrir la demanda, ignorando las externalidades ambientales. Esta investigación presenta el desarrollo de un modelo equivalente del Sistema Interconectado Nacional (SIN) en la plataforma de optimización PyPSA, estructurado con base en las Gerencias de Control Regional descritas en el PRODESEN. El objetivo principal es modelar y contrastar dos mecanismos de política ambiental enfocados en la mitigación del cambio climático: el instrumento económico (señales de precio) y el de comando y control (límites rígidos). A diferencia de los enfoques convencionales enfocados únicamente en el Dióxido de Carbono (CO<sub>2</sub>), esta propuesta metodológica integra un análisis multigas mediante el cálculo de CO<sub>2</sub> equivalente (CO<sub>2</sub>eq), incorporando los Potenciales de Calentamiento Global (GWP) del Metano (CH<sub>4</sub>) y el Óxido Nitroso (N<sub>2</sub>O) bajo el Sexto Informe de Evaluación (AR6) del IPCC. Asimismo, se internaliza el impacto del Carbono Negro (BC) debido a su alto forzamiento radiativo local y sus efectos críticos en la salud pública, derivando su señal ambiental a partir de los criterios de equivalencia del INECC.

Para la evaluación, se simulan tres escenarios operativos: 1. Escenario Base, que replica la operación económica actual del SIN; 2. Escenario de Señales de Precio, donde se modifica la función objetivo internalizando un costo de alta ambición climática alineado con el Acuerdo de París (\$90 USD/tCO<sub>2</sub>,eq) y su equivalente proporcional para el BC). 3. Escenario de Comando y Control, que impone techos máximos de emisión como restricciones duras en el algoritmo de optimización. Los resultados preliminares del modelo permiten cuantificar el desplazamiento tecnológico de centrales fósiles (particularmente termoeléctricas convencionales basadas en combustóleo) hacia ciclos combinados eficientes y fuentes renovables. Finalmente, el trabajo aporta una metodología robusta para evaluar el impacto de estas restricciones en la formación del Precio Marginal Local (PML) y sus componentes de energía y congestión, ofreciendo una perspectiva técnica vital para la planeación y estrategia operativa del sistema eléctrico mexicano.

Agradecimientos: Familia y colegas.

[1] Autores, Título, Revista Vol., Num. (Año)

## **Síntesis y caracterización de películas delgadas nanoestructuradas de YSZ con potencial aplicación en celdas de combustible.**

Mario Fidel García Sánchez<sup>1</sup>, Kevin Enrique Salazar Martínez<sup>1</sup>, Miguel Antonio Domínguez Crespo<sup>2</sup>

<sup>1</sup>UPIITA-IPN, Av. I.P.N. 2580, Col. Barrio La Laguna Ticomán, Gustavo A. Madero, C.P. 07340, CDMX.

<sup>2</sup>UPIIH-IPN, Carretera Pachuca - Actopan Kilómetro 1+500, C.P 42162, Hidalgo.

Correo electrónico: ksalazarm1501@alumno.ipn.mx

Las celdas de combustible de óxido sólido (SOFC por sus siglas en inglés) son una alternativa prometedora para la conversión eficiente y limpia de energía; sin embargo, sus altas temperaturas de operación siguen siendo una limitante tecnológica [1]. En este trabajo se propone la síntesis y caracterización de películas delgadas nanoestructuradas de zirconia estabilizada con itria (YSZ por sus siglas en inglés) con potencial aplicación como electrolito en SOFC. Las películas serán obtenidas mediante rocío pirolítico ultrasónico, técnica de bajo costo y adecuada para la deposición de óxidos cerámicos [2]. La caracterización estructural se realizará por difracción de rayos X (XRD por sus siglas en inglés) para identificar fases cristalinas, orientación preferencial y calcular el parámetro de celda, evaluando la influencia del dopaje con itrio. La morfología superficial será analizada mediante microscopía electrónica de barrido (SEM por sus siglas en inglés) con el fin de observar la homogeneidad y continuidad de las películas. Este estudio busca aportar bases estructurales y morfológicas para el desarrollo de electrolitos delgados aplicables en SOFC de temperatura intermedia.

### **Agradecimientos**

Este trabajo contó con el apoyo del IPN bajo el proyecto SIP 20250260, así como de la Secretaría de Educación, Ciencia, Tecnología e Innovación (SECTIHI) a través de la beca otorgada en el marco de las "Becas Nacionales para estudios de Posgrado".

[1] D. Perednis and L. J. Gauckler, "Solid oxide fuel cells with electrolytes prepared via spray pyrolysis," *Solid State Ionics*, vol. 166, no. 3–4, pp. 229–239, 2004.

[2] A. O. Stoermer, J. L. M. Rupp, and L. J. Gauckler, "Spray pyrolysis of electrolyte interlayers for vacuum plasma-sprayed SOFC," *Solid State Ionics*, vol. 177, no. 19–25, pp. 2075–2079, 2006.

## **Interacción entre el monómero de celulosa ( $\beta - D - Glucopiranos$ ) e hidróxido de sodio (NaOH): un estudio DFT**

Omar Rodríguez Rivero<sup>1</sup>, G. Ramírez Damaso<sup>1</sup>, T. Ramírez Rodríguez<sup>2</sup>, F.L. Castillo Alvarado<sup>1</sup>, F. Caballero<sup>3</sup>.

<sup>1</sup> *Departamento de Física, Escuela Superior de Física y Matemáticas del Instituto Politécnico Nacional, 07738, GAM, Ciudad de México, México*

<sup>2</sup> *Departamento de Acabados, Escuela Superior de Ingeniería Textil del Instituto Politécnico Nacional, 07738, GAM, Ciudad de México, México*

<sup>3</sup> *Carrera de Ingeniería Química, Facultad de Estudios Superiores Zaragoza-UNAM, Batalla 5 de mayo s/n. 09230, Iztapalapa, CDMX, México*

Email: ohmarsvolta@gmail.com

La modificación alcalina de materiales celulósicos representa una etapa fundamental en la obtención de fibras precursoras de carbón activado, debido a los cambios estructurales y electrónicos inducidos en los sistemas celulósicos durante el tratamiento químico. En este trabajo se presenta un estudio computacional mecánico-cuántico de la interacción entre el hidróxido de sodio (NaOH) y el monómero  $\beta$ -D-Glucopiranos, empleada como estructura molecular representativa de la celulosa presente en fibras de algodón. Para investigar el mecanismo de interacción molecular, la estabilidad estructural y el comportamiento electrónico del sistema, se utilizaron cálculos basados en la Teoría de los Funcionales de la Densidad (DFT) mediante el módulo DMol<sup>3</sup> del software Materials Studio. Se obtienen descriptores electrónicos y de reactividad global, incluyendo las energías de los orbitales moleculares de frontera (HOMO - LUMO), el ancho de banda prohibida ( $\Delta E_{gap}$ ), con el propósito de analizar la estabilidad electrónica, optimización geométrica y la capacidad de interacción del complejo molecular. Los resultados permiten identificar modificaciones significativas en la geometría molecular, redistribución de densidad electrónica, transferencia de carga y formación de enlaces de hidrógeno asociados al tratamiento alcalino. Asimismo, las energías de interacción muestran valores favorables y espontáneos, indicando una interacción estable entre NaOH y la estructura celulósica. También se obtienen resultados relevantes sobre los mecanismos fisicoquímicos involucrados en la mercerización y funcionalización de fibras celulósicas, contribuyendo a la comprensión molecular de procesos de modificación química orientados al desarrollo de materiales carbonosos avanzados con potencial aplicación en adsorción y remoción de contaminantes.

### **Agradecimientos**

G. Ramírez D. agradece a SIP IPN: 20250097 e IND-2026-0126, así como a EDI, COFAA-Instituto Politécnico Nacional y SNII-SECIHTI, México. F. L. Castillo A. reconoce el apoyo de SNII-SECIHTI, México. O. Rodríguez R. reconoce el apoyo de SECIHTI México.

## Referencias

[1] Autores, Título, Revista **Vol.**, Num. (Año)

[1] Refaat, A., Elhaes, H. & Ibrahim, M.A. Effect of alkali metals on physical and spectroscopic properties of cellulose. *Sci Rep* 13, 21649 (2023). [https://www.nature.com/articles/s41598-023-48850-7?utm\\_source=chatgpt.com](https://www.nature.com/articles/s41598-023-48850-7?utm_source=chatgpt.com)

[2] Yayun Zhang, Chao Liu, Hui Xie, Mechanism studies on  $\beta$ -d-glucopyranose pyrolysis by density functional theory methods, *Journal of Analytical and Applied Pyrolysis*, Vol 105, January (2014), Pages 23-34. <https://doi.org/10.1016/j.jaap.2013.09.016>

[3] Zhiwei Jiang Yan Fang Junfeng Xiang Yanping Ma Ang Lu Hongliang Kang Yong Huang Hongxia Guo Ruigang Liu Lina Zhang, Intermolecular Interactions and 3D Structure in Cellulose–NaOH–Urea Aqueous System, *The J. Phys. Chem. B* (2014), 118, 34, 10250–10257. <https://doi.org/10.1021/jp501408e>

[4] B. J. C. Duchemin, Mercerisation of cellulose in aqueous NaOH at low concentrations, *Green Chemistry*, (2015),17, 3941-3947. <https://doi.org/10.1039/C5GC00563A>

[5] Hui Zhao, Na Qi, Ying Li, Interaction between polysaccharide monomer and SiO<sub>2</sub>/Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>/CaCO<sub>3</sub> surfaces: A DFT theoretical study, *Applied Surface Science*, Vol 466, (2019). <https://doi.org/10.1016/j.apsusc.2018.10.085>

[6] Gunnarsson, M., Bernin, D. & Hasani, M. The CO<sub>2</sub>/CO<sub>3</sub><sup>2-</sup>–chemistry of the NaOH(aq) model system applicable to cellulose solutions. *Cellulose* 27, 621–628 (2020). <https://doi.org/10.1007/s10570-019-02782-6>

[7] Axel D. Becke, Densityfunctional thermochemistry. III. The role of exact exchange, *J. Chem. Phys.* 98, 5648 (1993). <http://link.aip.org/link/doi/10.1063/1.464913?ver=pdfcov>

[8] J.K. Brennan, T.J. Bandosz, K.T. Thomson, K.E. Gubbins, Water in porous carbons, *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects* 187–188(0) (2001) 539- 568 [http://dx.doi.org/10.1016/S0927-7757\(01\)00644-6](http://dx.doi.org/10.1016/S0927-7757(01)00644-6)

[9] Franek, A. Koncagul, E. Connor, R. Diwata, H. 2015. United Nations World Water Report: Water for a Sustainable World: Facts and Figures. 12 pp

[10] Echeatl, A y Chávez, L. 2010. Production and characterization of activated charcoal using bean pod: extraction of Cd<sup>2+</sup> in aqueous solution. *Engineering* 13 48: 8- 15. ISSN 1405-0676

[11] Hsieh, Y. L. "Chemical structure and properties of cotton." *Cotton: Science and technology*, 2007. <http://dx.doi.org/10.1533/9781845692483.1.3>

- 12] Fernández, J., Bonastre, J., Molina, J., del Río, A. I. & Cases, F. (2017). Study on the specific capacitance of an activated carbon cloth modified with reduced graphene oxide and polyaniline by cyclic voltammetry. *European Polymer Journal*, 92, 194-203. <http://dx.doi.org/10.1016/j.eurpolymj.2017.04.044>
- [13] Kabir, M. M., et al. “Chemical treatments on plant-based natural fibre reinforced polymer composites: An overview”. *Composites Part B: Engineering*, Vol. 43, No 7, 2012. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2012.04.053>
- [14] Yang, J., Ching, Y. C., & Chuah, C. H. (2019). Applications of lignocellulosic fibers and lignin in bioplastics: A review. *Polymers*, 11(5), 751. <https://doi.org/10.3390/polym11050751>
- [15] Chen H. “Chemical Composition and Structure of Natural Lignocellulose” *Biotechnology of Lignocellulose*. Springer, Dordrecht. 2014. [https://doi.org/10.1007/978-94-007-6898-7\\_2](https://doi.org/10.1007/978-94-007-6898-7_2)

# Estudios ab-initio de la antiperovskita (LiFe)<sub>3</sub>SO para el uso de almacenamiento de energía

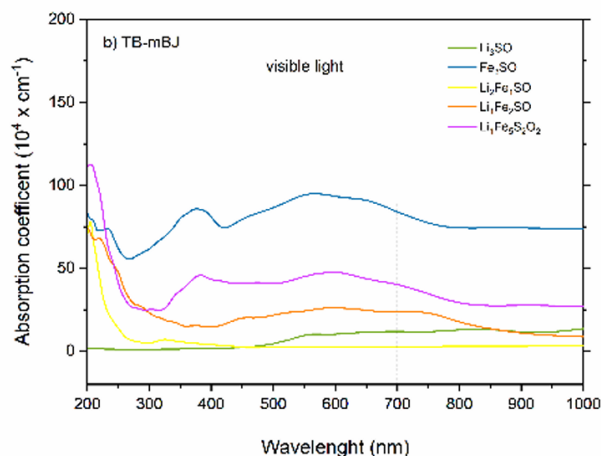
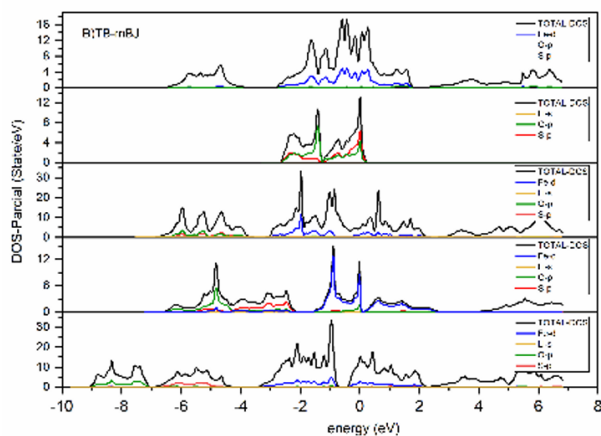
Eduardo Azael Hoy Canul<sup>1</sup>, Zakaryaa Zarhri<sup>2,\*</sup>

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

<sup>2</sup>Facultad de Ciencias Químicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Morelos (UAEM), Av. Universidad 1001, Col. Chamilpa, C.P. 62209, Cuernavaca, Morelos, Mexico

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

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



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

## Vanadium Oxide Thin Films as Catalysts for Green Hydrogen Production

Pastor A. Rodríguez Echeverría, Mario F. García Sánchez

*Unidad Profesional Interdisciplinaria en ingeniería y tecnologías Avanzadas- Instituto Politécnico Nacional*

Correo electrónico: [prodrigueze1300@alumno.ipn.mx](mailto:prodrigueze1300@alumno.ipn.mx), [pastor.upiita@gmail.com](mailto:pastor.upiita@gmail.com)

Este estudio aborda la necesidad urgente de mitigar el cambio climático mediante el desarrollo de fuentes de energía limpia, destacando al hidrógeno verde como una alternativa prometedora por su potencial en almacenamiento y transporte de energía renovable [1]. El objetivo fue evaluar la viabilidad de los óxidos de vanadio como catalizadores en la producción de hidrógeno vía electrólisis. Para ello, se sintetizaron películas delgadas nanoestructuradas de óxido de vanadio mediante la técnica de Rocio pirolítico ultrasónico, empleando acetilacetato de vanadilo como precursor [2]. Las películas fueron caracterizadas estructural y ópticamente, confirmando mediante difracción de rayos X y espectroscopía UV-Vis la presencia de fases  $\text{VO}_2$  y  $\text{V}_2\text{O}_5$ . La evaluación electroquímica, realizada mediante voltamperometría cíclica y cronoamperometría, demostró fotoactividad y comportamiento catalítico adecuado para las reacciones de evolución de hidrógeno. Las películas sintetizadas a  $350\text{ }^\circ\text{C}$  y  $400\text{ }^\circ\text{C}$  exhibieron la mayor producción de hidrógeno a bajos potenciales eléctricos, mientras que a potenciales más altos los procesos electrolíticos resultaron menos eficientes [3]. En conclusión, las propiedades estructurales, ópticas y electroquímicas de las películas de óxido de vanadio indican su potencial como catalizadores efectivos para la generación de hidrógeno verde, contribuyendo al avance de tecnologías sostenibles para la transición energética.

### Agradecimientos

Agradecemos a las instituciones por el apoyo financiero: IPN y SECIHTI

[1] Aerosol-assisted chemical vapour deposited vanadium oxide thin films on nickel foam with auspicious electrochemical water oxidation properties, *International Journal of Hydrogen Energy*, 2024. [2] In situ formed vanadium-oxide cathode coatings for selective hydrogen production, *Applied Catalysis B: Environmental*, 2019.

[3] Voloshin B.V., Seleznev V.A., Golyashov V.A., Atomic Layer Deposition Synthesis of Thin Films of Vanadium Oxides in a Reducing Hydrogen Atmosphere, *Journal of Structural Chemistry*, 2024.

## **Nanoestructuras unidimensionales de óxido de zinc sintetizadas mediante la técnica Vapor-Líquido-Sólido para la degradación de contaminantes emergentes**

José Francisco Malagón García<sup>1</sup>. Mario Fidel García Sánchez<sup>1</sup>, Ateet Dutt<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Unidad Profesional Interdisciplinaria en Ingeniería y Tecnologías Avanzadas, Instituto Politécnico Nacional, Avenida Instituto Politécnico Nacional No. 2580, 07340, Ciudad de México, Mexico.*

<sup>2</sup>*Instituto de Investigaciones en Materiales, Circuito Exterior, Investigación Científica S/N, C.U., Coyoacán, 04510 Ciudad de México, México.*

Correo electrónico: [paco\\_pp@ciencias.unam.mx](mailto:paco_pp@ciencias.unam.mx)

En la actualidad, la presencia de contaminantes emergentes en cuerpos de agua representa un desafío ambiental y de salud pública cada vez mayor, debido a que muchos de estos compuestos, como antibióticos, colorantes, productos farmacéuticos y cosméticos, presentan una alta estabilidad química que dificulta su eliminación mediante los procesos convencionales de tratamiento de agua. En este contexto, los procesos de oxidación avanzada surgen como una de las alternativas más prometedoras para su degradación. Este trabajo tiene como objetivo sintetizar y optimizar nanoestructuras unidimensionales de óxido de zinc (ZnO) para la eliminación de contaminantes emergentes en medios acuosos. Para ello, las nanoestructuras son sintetizadas mediante la técnica Vapor-Líquido-Sólido (VLS), utilizando oro como catalizador. La modificación de parámetros de crecimiento, tales como la temperatura, permite controlar la morfología, la orientación y los defectos presentes en la estructura cristalina. La actividad fotocatalítica de las nanoestructuras de ZnO se evalúa bajo irradiación UV, promoviendo la generación de pares electrón-hueco que reaccionan con el medio acuoso para producir especies reactivas de oxígeno, responsables de la degradación de los contaminantes. Se espera que la optimización de las propiedades físicas y químicas de las nanoestructuras incremente la adsorción y degradación de contaminantes emergentes, favoreciendo su transformación en compuestos menos nocivos o incluso su completa mineralización, contribuyendo así al desarrollo de tecnologías sostenibles para el tratamiento avanzado de aguas.

### **Agradecimientos**

Proyecto SECIHTI 20260082

## **Desarrollo del 6to principio de la química verde durante la síntesis de un nanomaterial con presencia de actividad antimicrobiana**

Vianey Urdapilleta-Inchaurregui<sup>1</sup>, Rafael Colin-López<sup>1</sup>, Janies Merari García-Velasco<sup>1</sup>, Estrella Suarez María-Verónica<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Escuela Superior de Física y Matemáticas del Instituto Politécnico Nacional (ESFM IPN), Ingeniería y ciencias Sociales, México.*

<sup>2</sup>*Instituto Tecnológico de Tlanepantla, Tecnológico Nacional de México*

Correo electrónico: rcolin1900@alumno.ipn.mx

En la síntesis de nanomateriales, uno de los retos más importantes no solo es producirlos con las propiedades deseadas, sino hacerlo de manera que cumplan los 12 principios de la química verde. La poca difusión de indicadores comparables limita la capacidad de valorar objetivamente los proyectos que buscan la química verde. Por ello, resulta indispensable construir un historial de consumo energético, que permita avanzar hacia el establecimiento de métricas y su cumplimiento. El trabajo previo fue realizado por un equipo multidisciplinario. Llevando a cabo simulaciones computacionales para optimizar los parámetros de síntesis del nanomaterial y predecir sus propiedades, se ejecutaron las síntesis físicas, registrando tiempos de operación, condiciones de proceso y cantidades de nanomaterial obtenido. La presente investigación se realiza considerando los 12 principios y se enfoca en desarrollar el principio 6 que dice “Diseño para la Eficiencia Energética”. Para lo cual se recopilaron registros históricos provenientes de mediciones de laboratorio y bases de datos internas. Posteriormente, los datos se sistematizaron y transformaron en métricas comparables. El trabajo dio lugar a tablas y gráficas que muestran cómo han cambiado los consumos y los costos energéticos a lo largo de los experimentos realizados. A partir de ahí se calculó el índice de energía estableciéndose como métrica principal para obtener la eficiencia energética. Este trabajo muestra que reunir y transformar los datos en indicadores comparables es un paso clave para evaluar la eficiencia energética en la producción de nanomateriales.

### **Agradecimientos**

Esta investigación fue financiada por el Instituto Politécnico Nacional (IPN), proyecto número 20250631 y 20260329, y por la Secretaría de Ciencia, Innovación y Tecnología (SECIHTI). NOM-127-SSA1-2021 Agua para consumo humano. (n.d.).

Pedro Arrojo Agudo, & UN. Human Rights Council. Special Rapporteur on the Human Right to Safe Drinking Water and Sanitation. (2024). El nexos entre el agua y la economía: gestionar el agua para usos productivos desde la perspectiva de los derechos humanos. <https://www.rivers.gov/about>.

URDAPILLETA INCHAURREGUI VIANEY. (2020). Diseño y evaluación de filtro purificador de agua a partir de nanopartículas manufacturadas, nanopartículas del suelo y materiales reciclados.

## Propiedades electroquímicas de películas delgadas de óxido de cerio nanoestructurado

Gabriela M. Reyes Ch.<sup>1</sup>, Mario F. García Sánchez<sup>1</sup>, Inti Z. Dubé<sup>2</sup>

<sup>1</sup>*Instituto Politécnico Nacional – UPIITA. CDMX, México*

<sup>2</sup>*Laboratory of Ion Channel Research. VIB-KU Leuven. Leuven, Belgium*

Correo electrónico: [greyesc1003@alumno.ipn.mx](mailto:greyesc1003@alumno.ipn.mx)

La creciente crisis ambiental y el aumento de la población mundial han impulsado la búsqueda de fuentes de energía más sostenibles para satisfacer la demanda de las grandes ciudades e industrias. En México, donde el 80% de la energía se produce a partir de combustibles fósiles, se ha impulsado la transición a fuentes más limpias como la energía eólica y solar, sin embargo, se enfrentan desafíos como la necesidad de un suministro constante de energía. Una alternativa es el uso de hidrógeno como vector energético, ya que es uno de los combustibles que presenta el mayor contenido energético por unidad de masa. Sin embargo, su producción a menudo depende de métodos altamente contaminantes como el reformado de metano por vapor. Por lo que, la búsqueda de soluciones tecnológicas para la producción de hidrógeno verde, sin emisiones ni residuos es de interés para la comunidad científica. A pesar, de los desafíos, el hidrógeno ofrece ventajas, como un ciclo de vida más largo en comparación con las baterías y una alta densidad energética. La electrólisis se propone como un método de obtención más limpio, pero es menos eficiente y más costoso en comparación con otros métodos. Es por eso que los esfuerzos se han enfocado en la búsqueda de catalizadores, como el óxido de cerio ( $\text{CeO}_2$ ), para aumentar la eficiencia en la producción de hidrógeno verde.

En este trabajo se sintetizaron películas delgadas de  $\text{CeO}_2$  por la técnica de rocío pirolítico ultrasónico, depositadas sobre sustratos de tipo FTO, acero inoxidable y titanio. Obteniendo películas policristalinas con la fase cúbica del  $\text{CeO}_2$ , con un ancho de banda prohibido en un rango de 3.0 y 3.3. Las caracterizaciones electroquímicas muestran que el proceso de electrólisis tiene lugar por encima de -1.3 V, con un potencial de -1.7V se obtienen rendimientos de hasta  $-15\text{mA}/\text{cm}^2$ . Se estimó la posición de bandas de las películas respecto al potencial de oxidación y reducción de la molécula del agua, a pH de 6.4 y respecto al electrodo de Ag/AgCl, lo que demuestra que las películas delgadas de  $\text{CeO}_2$  son viables para su aplicación en el proceso fotoelectrocatalítico de división de agua.

### Agradecimientos

Los autores agradecen a SECIHTI por la beca otorgada a través del programa de becas nacionales de posgrado y al proyecto 20260082

[1] Dairusz P., Use of Hydrogen in public transport systems, Journal of Cleaner Production, Vol. 335, 130247 (2022)

[2] Francesco D., Incentives and egal barriers for power-to-hydrogen pthways: An international snapshot, International Journal of Hydrogen Energy, Vol. 44, 11394 (2019)

[3] HINICIO, Hidrógeno verde en México: el potencial de la transformación, Tomo III (2021)

[4] Gabriela R., Síntesis de películas delgadas de óxido de cerio para aplicaciones electroquímicas. Tesis de Maestría, IPN (2021)

**Análisis modal y armónico de placas piezoeléctricas cilíndricas basados en simetría: comparación de placa piezoeléctrica completa vs 1/8.**

Axayácatl A. N. Montiel, J. Enrique Chong-Quero, José A. Otero  
*Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de México.*

Se presenta un estudio de análisis modal y armónico de placas piezoeléctricas cilíndricas mediante el método de elementos finitos, comparando un modelo completo con un sector reducido de 1/8 bajo condiciones de simetría apropiadas. Se capturaron todos los modos principales en 8 condiciones de simetría derivadas de las relaciones constitutivas. También, se realizó una comparación experimental del análisis armónico de anillas piezoeléctricas a diferentes diámetros exteriores.

## **Development of Bio-Based Core-Shell Phase Change Microcapsules for Thermal Energy Storage**

Dannya Martinez-Cervantes<sup>1</sup>, Dulce V. Melo-Maximo<sup>2</sup>, J. Enrique Chong-Quero<sup>1</sup> and José A. Otero<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Escuela de Ingeniería y Ciencias, Tecnológico de Monterrey, Campus Estado de Mexico.

<sup>2</sup> Universidad Politécnica del Valle de México, Tultitlán 54910, Estado de México, Mexico}

Improving thermal energy storage is essential for developing more energy-efficient and sustainable systems. This work presents the fabrication of bio-based core-shell microcapsules using coconut oil and sodium alginate through a custom-designed coaxial encapsulation system. The proposed methodology enabled controlled microcapsule formation while improving structural integrity and PCM retention. Morphological characterization confirmed the successful formation of spherical core-shell structures, while thermal analyses demonstrated their capacity to absorb and store heat during repeated thermal cycles. Experimental evaluations, including thermal cycling tests and incorporation into wall systems, revealed the influence of the microcapsules on heat transfer and temperature regulation. These results support the use of sustainable microencapsulated PCMs in future thermal energy storage and energy-efficient building applications.

**Keywords:** Phase Change Materials (PCMs), Thermal Energy Storage, Bio-Based Materials, Microencapsulation, Coconut Oil, Sodium Alginate, Thermal Cycling, Building Materials, Coaxial Encapsulation System.

## **A Hybrid Machine Learning Framework for Solving the Inverse Problem in Laminated Composites**

Rodrigo Correa López<sup>1</sup>, José Antonio Otero Hernández<sup>1</sup>, Ángel Alejandro García Chung<sup>2</sup>

<sup>1</sup> *School of Engineering and Sciences, Instituto Tecnológico y de Estudios Superiores de Monterrey, , Atizapán de Zaragoza, México*

<sup>2</sup> *Universidad Autónoma Metropolitana, School of Engineering and Sciences, Coyoacán, México*

Inverse identification of elastic parameters in laminated composite materials is a complex challenge due to the nonlinear and ill-posed relationship between constituent properties and homogenized responses. This work introduces a hybrid computational framework that integrates the Asymptotic Homogenization Method (AHM), Artificial Neural Networks (ANNs), and constrained optimization for the inverse reconstruction of constituent parameters. A synthetic dataset was generated via Latin Hypercube Sampling and analytical homogenization, enabling the training of forward and inverse ANNs to approximate direct and inverse mappings. To mitigate non-uniqueness, the inverse ANN was embedded within a multi-stage optimization strategy combining stochastic exploration, nearest-neighbor initialization, global pattern search, and local sequential quadratic programming. Numerical experiments and stability analyses demonstrated accurate recovery of physically admissible parameters, with consistent convergence across repeated runs. The proposed methodology offers an efficient and extensible approach for inverse homogenization, with potential applications in composite characterization, uncertainty-aware modeling, and data-driven material design.

**Keywords:** Inverse problem; Laminated composites; Artificial neural networks; Machine learning; Optimization; Effective properties.