

## Reseñas de tesis de postgrado 2007

### PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRÓNICAS DE $Zr_xAl_{1-x}N$ EN FASE CÚBICA USANDO PRIMEROS PRINCIPIOS

**Estudiante:** Edgardo David Gutiérrez Senior

**Director:** Dr. Jairo Arbey Rodriguez Martínez

Recientemente se han depositado películas delgadas de  $Zr_xAl_{1-x}N$ , con concentraciones de Al comprendidas entre 0 y 0.73 usando el método de *sputtering*. En la caracterización de tales películas, se ha hallado que este material crece en fases cúbica y hexagonal. En esta Tesis de Maestría se propone el estudio teórico de la estructura electrónica y geométrica en la fase cúbica como función de la concentración  $x$  del  $Zr_xAl_{1-x}N$ . El estudio consistirá en la determinación de la constante de red de cada concentración, el volumen de la celda unitaria, el módulo de volumen para concentraciones comprendidas entre 0 y 1, en particular para  $x = 0,0$ ,  $x = 0,25$ ,  $x = 0,50$ ,  $x = 0,75$  y  $x = 1,0$ . También, para cada una de las concentraciones se estudiarán las propiedades electrónicas, consistentes en el análisis de los gráficos de energía de los electrones contra el vector de onda, en algunos caminos de la primera zona de Brillouin; también se calcularán las densidades de estados (DOS) como función de la energía. De allí se determinará si el material presenta características de metal o semiconductor. Este estudio se hace necesario ya que en este material las características electrónicas son dependientes de la concentración  $x$ . Así mismo, las propiedades ópticas también dependen de ella.

---

El estudio se realizará usando DFT (Density Functional Theory) y el método LAPW (Linear Augmented Plane Wave), con la aproximación de gradiente generalizado (GGA) de Perdew-Burke-Ernzerhof (1996).

Este material, debido a su reciente sintetización no ha sido estudiado de manera intensiva ni teórica ni experimentalmente. Para ello, el estudio que se propone, no ha sido realizado hasta el momento y esperamos que los resultados sean un aporte al desarrollo de la ciencia de la materia condensada.

## OPTIMIZACIÓN DE UNA FUENTE DE IONES PLASMATRÓN PARA LA PRODUCCIÓN DE IONES NEGATIVOS DE HIDRÓGENO

**Estudiante:** Martha Yamile Segura Sarmiento

**Director:** Dr. Gustavo Martínez Tamayo

Se caracteriza en términos de voltaje de descarga y presión de gas, la fuente de iones tipo plasmatrón del espectrómetro de colisiones para optimizar la producción de iones negativos de hidrógeno. Para esto, se estudian las propiedades atómicas de este ión pasando por la revisión de algunos métodos para el cálculo de la energía de enlace del electrón extra en la formación de  $H^-$  y se comparan estos resultados con lo obtenidos mediante el modelo de Thomas-Fermi.

Se revisan los tipos de fuentes de producción superficial y volumétrica utilizadas actualmente para la obtención de haces de iones negativos, señalando las ventajas y desventajas de cada una. Se analizan además los diferentes mecanismos de producción y destrucción de iones negativos de hidrógeno en plasmas de volumen, en términos de sección eficaz, tasas de reacción y energía del electrón o el proyectil incidente, con el fin de identificar los mecanismos predominantes en la fuente de iones según los resultados obtenidos, y se estudia la posible utilización de la corriente iónica obtenida para la realización de experimentos de pérdida de energía.

## SIMULACIÓN NUMÉRICA DE UN AGUJERO NEGRO DE SCHWARZSCHILD

**Estudiante:** Edgar Miguel Vargas C.

**Director:** Juan Manuel Tejeiro Sarmiento, Dr. rer. nat.

Las simulaciones por computador están permitiendo que los investigadores estudien sistemas extremadamente difíciles de trabajar analíticamente. En el caso particular de la Relatividad General, los modelos numéricos han probado su gran valor en las investigaciones sobre campos gravitacionales fuertes y dinámicos. Se están llevando a cabo esfuerzos considerables para simular sistemas astrofísicamente relevantes, entender diferentes aspectos de la teoría y hasta para colaborar en la búsqueda de una teoría cuántica de la gravedad. En el presente trabajo se realiza la simulación de un agujero negro de Schwarzschild utilizando el software Cactus, y considerando una selección particular y compatible de los siguientes componentes fundamentales: formalismo de evolución, calibración, condiciones iniciales y de frontera y algoritmos numéricos; adicionalmente, se validan los resultados numéricos generados por la simulación con algunos resultados analíticos conocidos para este sistema físico.

## ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES DE TRANSPORTE EN JUNTURAS SUPERCONDUCTORAS DE DOBLE BARRERA AISLANTE

**Estudiante:** Shirley Gómez Paez

**Director:** Dr. William Javier Herrera

En este trabajo analizamos el efecto Tomash en superconductores de alta temperatura crítica. Para esto, estudiamos un sistema de

doble barrera aislante NISIN (N: Metal en el estado normal, I: Aislante y S: Superconductor) a partir de las ecuaciones de Bogoliubov de Gennes. Encontramos que la conductancia diferencial presenta resonancias al variar el voltaje aplicado, éstas son originadas por la formación de estados cuasiligados en la región superconductora. El voltaje para el cual aparecen las resonancias, su número y ancho dependen de la simetría del potencial de pares y son afectados por las fortalezas de las barreras aislantes. Desarrollamos un modelo analítico para encontrar las energías de los estados cuasiligados y su tiempo de vida media, dicho modelo nos permite calcular el voltaje para el cual aparece cada resonancia y su ancho.

## LA TRANSICIÓN DE FASE QUIRAL EN EL LÍMITE DE GRAN N

**Estudiante:** Efrain Arismendi Alfonso

**Director:** Dr. Jhon Morales Aponte

Si se tiene en cuenta que la simetría Chiral no es exacta, y por lo tanto, ésta no puede ser restaurada en una transición de fase a temperatura finita, el segundo mínimo, puede producir algunos efectos de una transformación de fase de primer orden. La forma del potencial a temperatura cero y finita debe tener una estructura que no es trivial cuando la masa de los piones es diferente de cero, característica a la cual se debe prestar atención por lo tanto, vamos a explorar el potencial efectivo, la parte del lagrangiano que rompe explícitamente la simetría. En ausencia de este término, el potencial tiene la forma del fondo de una botella de vino. La simetría Chiral está explícitamente rota en el vacío, el pión es un bosón de Goldstone, y el campo sigma tiene una masa del orden de 1-2 V. La corriente Chiral axial es conservada. Esto es debido a que la simetría es restaurada mediante una transición de fase, la cual es quizás de segundo orden, a una temperatura crítica de 160 MeV.

## ESTUDIO AB-INITIO DE LA SUPERFICIE (0001) DE h-BN

**Estudiante:** Patricia Morales Espinosa

**Director:** Dr. Jairo Arbey Rodríguez Martínez

El estudio de las propiedades estructurales y eléctricas de la superficie (0001) en la fase hexagonal de BN se llevó a cabo en el marco de la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) utilizando el método de pseudopotencial (PW) con pseudopotenciales tipo ultrasuaves y la dinámica molecular de Car-Parrinello (CPMD).

Inicialmente se procedió a encontrar el valor óptimo de la energía de corte de las ondas planas de la base. Los parámetros estructurales del volumen fueron calculados y fueron utilizados en el modelamiento de la superficie. La superficie se modeló por *slab* con una geometría ( $2 \times 2$ ). El *slab* se construyó con siete (7) capas repetidas de h-BN y una región de vacío cuya dimensión es de  $3/2$  del valor del parámetro de red  $c$ . Con el método de Car-Parrinello se procedió a relajar la superficie y hallar las posibles reconstrucciones y relajaciones de ésta.

Los valores de los parámetros estructurales del volumen se hallaron con errores menores al 4%. Al relajar la superficie (0001) no se observaron cambios estructurales en su plano basal. Se encontró que las variaciones en las coordenadas  $x, y$  fueron menores a 0,002% y por lo tanto, los átomos no se movieron significativamente con respecto a las posiciones atómicas del volumen.

En el plano basal, la superficie presenta una hibridación  $sp^2$  que le permite obtener orbitales moleculares tipo  $\pi$  y orbitales  $\sigma$ . Se observa también que la región basal de la superficie de h-BN presenta un carácter metálico. En el eje  $z$  una separación significativa de las capas atómicas del *slab*. Esto indica que antes de la relajación se presentaba una fuerte interacción entre las capas que forzó su se-

paración. Después de esto, en el equilibrio, la interacción se torna débil. En el nivel de Fermi y en energías superiores, los orbitales dominantes son los  $p_z$  tanto de B como de N. Por ello, la conducción se debe fundamentalmente a estos orbitales. Los orbitales  $p_x$  y  $p_y$  son dominantes en la parte inferior al nivel de Fermi y ellos hibridizan como  $sp^2$  y su contribución al transporte es muy pequeño.

## SIMULACIÓN DE LA ROTACIÓN DEL MOTOR MOLECULAR F1-ATPasa POR EL MÉTODO DE DINÁMICA BROWNIANA.

**Estudiante:** Camilo Andrés Aponte Santamaría

**Director:** José Daniel Muñoz, Dr. rer. nat.

En este trabajo se simuló la rotación del motor molecular F1-ATPasa utilizando el método de dinámica browniana para dos secuencias de reacción de hidrólisis diferentes cuando un filamento de actina se pega a la subunidad Gamma (el rotor). El filamento de actina se trata, en primera aproximación, como una barra rígida que rota en torno a un eje transversal ubicado en una de sus puntas. La simulación se realizó asumiendo que el proceso está gobernado por una ecuación de Langevin acoplada a un sistema de ecuaciones cinético-químicas, que en conjunto pueden integrarse en el tiempo, para determinar la posición angular de la subunidad Gamma y el estado conformacional del complejo *Alpha3Beta3* (el estator). En la primera secuencia, propuesta por Boyer, Walker, Cross y colaboradores (WB-DBZHC) las subunidades Beta pueden estar en tres estados conformacionales: “abierto”, “débilmente ligado” y “fuertemente ligado”. En el segundo modelo, propuesto por M. Amzel y colaboradores (BHPA) existe otro estado intermedio adicional: “cerrado”. La frecuencia de rotación promedio obtenida en el modelo BHPA coincide excelentemente con los datos experimentales para un amplio rango de concentraciones de ATP que va desde 20nM has-

ta 2mM y para filamentos de actina de  $0,5 \times 10^{-6}$ m a  $4,0 \times 10^{-6}$ m de longitud. En contraste, el modelo WB-DBZHC arroja valores que discrepan hasta en un 50% de los experimentales. Estos resultados sugieren la F1-ATPasa funciona siguiendo la secuencia de reacción propuesta en el mecanismo BHPA.

## PRODUCCIÓN, CARACTERIZACIÓN Y ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES Y ELECTRÓNICAS DE LOS COMPUESTOS TIPO



**Estudiante:** Claudia Marcela Bonilla Escobar

**Director:** Dr. David Arsenio Landínez Téllez

Los materiales tipo perovskita compleja con fórmula  $A_2BB'O_6$  se han estudiado exhaustivamente debido a sus peculiares propiedades magnéticas y electrónicas que los hacen excelentes opciones para diseño de dispositivos espintrónicos. Un nuevo mecanismo de interacción, para estos compuestos, ha sido propuesto por Sarma recientemente en el que la hibridación de los niveles  $4d$  del  $MO$  y  $3d$  del  $F_e$  da lugar a una de las propiedades más interesantes en este tipo de materiales que es la *half*-metalicidad, con la que se garantiza una alta polarización de los portadores en la banda de conducción. En este trabajo se han escogido los óxidos  $Sr_2CoMoO_6$ ,  $Sr_2CoWO_6$ ,  $Sr_2CoReO_6$  para hacer un estudio sobre el efecto del cambio de catión no magnético  $B'$  en sus propiedades electrónicas y estructurales. Teóricamente se han calculado los volúmenes de equilibrio, las densidades de estados totales y parciales, así como la estructura de bandas de cada material usando el método de ondas planas linealizadas aumentadas en un potencial total (FP-LAPW) anmarcado en la teoría del funcional densidad (DFT). Con estos resultados se ha establecido que sólo el  $Sr_2CoWO_6$  y el  $Sr_2CoReO_6$  poseen las propiedades de *half*-metalicidad y de estos dos el mecanismo propuesto por Sarma sólo describe de manera completa el origen del

magnetismo y el mecanismo de conducción en el  $Sr_2CoReO_6$ . Experimentalmente se han producido muestras policristalinas de los tres materiales mediante el método de reacción de estado sólido. De ellas con fase pura el  $Sr_2CoWO_6$ , a la que se le ha hecho caracterización estructural a partir del refinamiento Rietveld del patrón de difracción de rayos X, se realizaron además medidas de resistividad vs. temperatura para encontrar que la muestra es aislante. Las muestras  $Sr_2CoMoO_6$  y  $Sr_2CoReO_6$  se obtuvieron con presencia de otras fases identificadas de los patrones de difracción de rayos X.

## ESTUDIO POR RESONANCIA PARAMAGNÉTICA ELECTRÓNICA EPR DE MONOCRISTALES KDP IRRADIADOS CON ELECTRONES DE ALTA ENERGÍA.

**Estudiante:** Miguel José Espitia Rico

**Director:** Dr. Ovidio Almanza Montero

La resonancia paramagnética electrónica EPR ha sido utilizada para estudiar los cambios producidos en los monocristales no dopados de fosfatos dihidrogenado de potasio ( $KH_2PO_4$  ó KDP) que fueron irradiados con haces electrones de 6 Mev de energía y recibieron dosis de 1, 21, 36 y 51 Gy. Se identificaron los centros paramagnéticos  $(PO_3)^{2-}$  los cuales son estables a temperatura ambiente. Este centro consiste en un electrón desapareado interactuando hiperfinamente con el espín nuclear del fósforo en distintas vecindades. Los espectros EPR fueron tomados a temperatura ambiente con el eje  $c$  del cristal perpendicular al campo magnético aplicado y se calculó la concentración de centros paramagnéticos en una función de la dosis suministrada, encontrando que la concentración absoluta de centros paramagnéticos  $(PO_3)^{2-}$  disminuye con la dosis recibida. Los monocristales utilizados para los estudios por Resonancia Paramagnética Electrónica EPR fueron crecidos por el método de

evaporación lenta del solvente de una solución acuosa saturada, los cristales así obtenidos son pequeños, con tamaños en el rango de 3-6 mm y velocidades de crecimiento en el rango de 0,5 - 1,5 mm/día. Por otro lado, desarrollamos una técnica de crecimiento rápido de monocristales obteniendo velocidades de crecimiento el rango de 50 - 60 mm/día.