

Reseñas de tesis de postgrado II-2006

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 cúbicas 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.

LEPTOGÉNESIS EN EL MODELO SIMÉTRICO IZQUIERDA - DERECHA

Estudiante: Alexander Moreno Briceño

Director: Dr. Carlos José Quimbay Herrera

Se estudia el mecanismo de la leptogénesis, tanto en el Modelo Estándar Electrodebil (MEE) como el Modelo Simétrico Izquierda-Derecha (MSID). Se estudia el mecanismo de leptogénesis en el contexto del MEE extendido por un sector de neutrinos pesados de Majorana y a partir del hecho de que dicho mecanismo es dominado por las interacciones del más ligero de los neutrinos de Majorana que violan la simetría CP se estima la Asimetría Bariónica del Universo (ABU) vía leptogénesis en el MEE extendido.

Con el fin de encontrar un origen natural a la ABU vía leptogénesis se estudia el MSID. Se estudia el marco más general posible del mecanismo see-saw en el MSID incluyendo todas las posibles fases de violación de CP que aparecen después de la implementación de dicho mecanismo. Analizando la asimetría CP en el decaimiento de neutrinos pesados en el contexto del MSID se establecen cotas superiores para esta asimetría dependiendo de la escogencia de fase

que se realice. Así se estimó la ABU vía leptogénesis a través del establecimiento de una cota inferior a la masa del mas liviano de los neutrinos pesados de Majorana, encontrando que el modelo satisface los parámetros relacionados con la física de los neutrinos a bajas y a altas energías.

DESARROLLO DE PROTOTIPO DE SISTEMA AUTÓNOMO DE MEDICIÓN Y MONITOREO DEL NIVEL DE AGUA UTILIZANDO INSTRUMENTACIÓN VIRTUAL

Estudiante: Johana Sofía Oyola Villegas

Director: Dr. Gerardo Gordillo Guzmán

El aporte más importante que se hizo en el marco de este trabajo fue el desarrollo de un prototipo de estación automatizada que permite medir y monitorear el estado del nivel de agua en tanques de almacenamiento en acueductos usando un sensor ultrasónico de nivel. Las pruebas se realizaron a nivel de laboratorio, sin embargo este desarrollo puede ser también usado para monitorear el nivel de agua de ríos y quebradas adecuando el diseño de la estructura que soporta el sensor e incorporando adicionalmente un sistema de transmisión inalámbrico de datos, ya que en el prototipo desarrollado, la transmisión de datos es física o vía internet.

El aspecto novedoso de este trabajo se relaciona por una parte con el hecho de que la medición y procesamiento de la señal generada por el sensor se realizó con un sistema desarrollado e implementado usando el concepto de Instrumentación Virtual y por otra parte con el hecho de que la estación opera en forma autónoma ya que ésta incluye una miniplanta que genera la potencia eléctrica requerida para su operación a través de módulos solares. Como hardware se utilizó una tarjeta de adquisición de datos y un computador personal y como software, el paquete de programación gráfica

LabView, a través del cual se desarrollo un intrumento virtual con facilidades para: medir la señal proveniente del sensor ultrasónico y convertirla en una variable que indica el nivel del agua en metros, monitorear en tiempo real el estado del nivel de agua en tanques de almacenamiento el cual se visualiza en la pantalla del computador, almacenar y procesar estadísticamente los datos y generar una alarma, tanto visual en la patalla del computador como sonora mediante activación de una sirena.

MODELO FENOMENOLÓGICO PARA LA IMPEDANCIA DE SUPERFICIE EN PELICULAS SUPERCONDUCTORAS DE ALTA TEMPERATURA CRÍTICA

Estudiante: Ariday Samit Mosquera Polo

Director: Dr. David Arsenio Landínez Téllez

Se presenta un modelo fenomenológico basado en el modelo de los dos fluidos, que explica satisfactoriamente datos experimentales de impedancia superficial para mircroondas en películas superconductoras de alta temperatura crítica.

Se describe la resistencia superficial en términos de la profundidad de penetración London, el tiempo de relajación de los portadores de carga normal y la conductividad normal. La reactancia superficial solo presenta dependencia con la profundidad de penetración London. Se introduce el factor de corrección A y el parámetro δ_2 para tener en cuenta los portadores de carga residual a temperatura cero, la variación de portadores de carga superconductor y profundidad de prenetración London con la temperatura es influenciada por el parámetro γ , el tiempo de relajación involucra además el parámetro de resistencia residual α , la conductividad normal es explicada por el modelo de conducción en metales.

Finalmente se simula con bastante aproximación resultados experimentales de profundidad de penetración London, tiempo de relajación, conductividad normal y resistencia superficial en función de la temperatura. Se encuentra que para aplicaciones prácticas en el rango de temperaturas $38 K < T < 78 K$, el modelo funciona con sólo dos parámetros: el parámetro γ y el parámetro de resistencia residual α .

CÁLCULO DE LA ESTRUCTURA DE BANDAS PARA EL ALUMINIO MEDIANTE EL EMPLEO DE ONDAS PLANAS

Estudiante: Yesid Alonso Parra Riveros

Director: Dr. Fabio Fajardo

Se utiliza el método de ondas planas para calcular la estructura de bandas en el aluminio teniendo en cuenta la teoría de pseudopotenciales. Inicialmente se expone una aplicación del método para un potencial particular, en este caso el de Mathieu. A partir de este modelo se variarán algunos parámetros, para comprender el comportamiento de las bandas y sus características más relevantes. Se finaliza haciendo un contraste entre los resultados obtenidos por el método de ondas planas con los de ondas planas ortogonalizadas, ondas planas aumentadas y funciones de Green. Adicionalmente se presenta una relación en la cual se muestra la dependencia del gap de energía de acuerdo con el pseudopotencial utilizado. Se concluyó que el método es bastante adecuado en metales, por su simplicidad matemática y la rapidez en la elaboración de los cálculos

TRANSICIÓN DE FASE COSMOLÓGICA ELECTRODÉBIL Y CONDESACIÓN DE BOSONES W

Estudiante: Carlos Andrés Peña Castañeda

Director: Dr. Carlos José Quimbay Herrera

Trabajando con el formalismo de tiempo imaginario de la teoría cuántica cuántica de campos a temperatura finita, se calcula el potencial termodinámico del modelo estándar electrodébil de partículas elementales, introduciendo en el sistema termodinámico tres potenciales químicos asociados con tres corrientes conservadas del modelo: electromagnética, débil neutra y leptónica. Calculando el valor esperado en el vacío del campo de Higgs a altas temperaturas, se obtiene las temperaturas críticas de la transición de fase cosmológica electrodébil y de la transición de fase de condesación de bosones W . Adicionalmente basados en la métrica de Robertson -Walker se calcula el parámetro de evolución del Universo en función de los potenciales químicos mencionados y se estiman los tiempos para los cuales ocurrieron estas dos transiciones de fase.

ESTRUCTURA TRIDIMENSIONAL DE ÁCIDOS KAURANÓICOS DE *AGERATINA VACCINIAEFOLIA* MEDIANTE RESONANCIA MAGNÉTICA NUCLEAR Y DIFRACCIÓN DE RAYOS X

Estudiante: Angélica del Pilar Huertas Rodríguez

Director: Dr. Jairo Arbey Rodríguez Martínez

Utilizando las técnicas de Resonancia Magnética Nuclear y Difracción de rayos X en monocristales se determinó la fórmula y la configuración tridimensional de dos sustancias extraídas de la planta

Ageratina Vacciniaefolia, endémica del subpáramo Colombiano. La planta fue recolectada en el páramo Cruz Verde ubicado sobre la vía Bogotá-Choachi (Cundinamarca). Luego, fue sometida a un proceso de extracción utilizando solventes de polaridad creciente, y las sustancias se aislaron por medio de cromatografía de columna y de capa fina. La identificación de las sustancias, fue realizada por medio del análisis de espectros de resonancia magnética nuclear, de espectros de infrarojo, punto de fusión, actividad óptica y el comportamiento de las sustancias ante algunos reactivos químicos. Las sustancias Angehu2 y Angehu3 fueron indentificadas como (-)-(β -glucopiranosiloxil)-kauran-19-oico-acid-y (-)-(16)-(β -glucopiranosiloxil)-17-ol-kauran-19-oico-acid respectivamente.

Para la determinación de la configuración tridimensional de las sustancias, se obtuvieron monocristales utilizando el método de evaporación lenta desde una solución. Los parámetros cristalográficos y las fases del factor de estructura fueron obtenidos directamente desde las intensidades del patrón de difracción de rayos X (métodos directos), el refinamiento de los modelos se realizó usando el método de mínimos cuadrados.

Finalmente las geometrías de las sustancias se optimizaron por el método cuántico autocosistente basado en Hartree Fock, utilizando como bases electrónicas funciones gaussianas.

ESTUDIO AB-INITIO DE LA ESTABILIDAD DEL COMPUESTO $YInN$

Estudiante: Gladys Patricia Abdel Rahim Garzón

Director: Dr. Jairo Arbey Rodríguez Martínez

En los últimos años nuevos experimentos han presentado el desarrollo de nuevos materiales presentan propiedades ópticas y

electrónicas interesantes. En este contexto la aleación YInN es un posible material atractivo para la industria por que está compuesto por dos materiales semiconductores: InN y YN

El estado base de cristalización para el InN es de tipo wurtzita con una posible transición de fase de la estructura wurtzita a la estructura NaCl a una presión relativamente baja de $P_T \approx 9 \text{ GPa}$. Este material es un semiconductor directo con una brecha de energía de $\approx 1,89 \text{ eV}$, con la característica de que al aumentar la presión la brecha de energía aumenta. Mientras que para el YN su estado base de cristalización es de tipo NaCl, y con una presión de $P_T \approx 138 \text{ GPa}$ la estructura cambia de NaCl a CsCl. Este material es un semiconductor indirecto con una brecha de energía de $\approx 0,3 \text{ eV}$ y al aumentar la presión la brecha de energía disminuye. De acuerdo con estas propiedades de estos materiales esperaríamos que la aleación $Y_{1-x}In_xN$ sea estable o a lo menos metaestable con las estructuras: NaCl, wurtzita y CsCl y que su estado base de cristalización se encuentre en alguna de ellas.

En este trabajo, presentamos el estudio acerca de la estabilidad estructural y electrónica del $Y_{1-x}In_xN$ en las fases NaCl, CsCl y wurtzita con concentraciones de Ytrio iguales a 0 %, 25 %, 50 %, 75 % y 100 %. Los cálculos fueron hechos en el marco de la teoría densidad funcional, usando el Método de Ondas Planas Aumentadas y Linealizadas (FP-LAPW), implementando en el código WIEN97. Los efectos de intercambio y correlación se trataron usando la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA) según parametrización implementando en el método Perdew-Burke-Ernzerhof.