

**Reseñas de tesis de postgrado 2006****PREPARACIÓN DE PELÍCULAS DELGADAS DE SnS  
Y ESTUDIO DE SUS PROPIEDADES ÓPTICAS Y  
FASES DE CRECIMIENTO.****Estudiante:** María Cristina Cifuentes Arcilla**Directora:** Dra. Clara Lilia Calderón

En este trabajo se sintetizó películas policristalinas de SnS por el método de coevaporación, que consiste en la reacción química entre la especie del precursor evaporada simultáneamente, y por el método de sulfurización de una película delgada de estaño. El SnS es un material relativamente un nuevo material, que exhibe las características excelentes que se utilizarán como capa absorbente en células solares.

La medidas de la difracción de rayos-x (XRD) de las películas desarrolladas indican que las muestras en varias fases (SnS, SnS<sub>2</sub> y Sn<sub>2</sub>S<sub>3</sub>) dependiendo de las condiciones de la deposición. Sin embargo, con un estudio exhaustivo de los parámetros de deposición se encontró las condiciones adecuadas para crecer películas delgadas con fase predominante SnS con la estructura orthorhombic. Fue encontrado que en este tipo de compuesto presenta un alto coeficiente de absorción (mayor de  $10^4 \text{ cm}^{-1}$ ) y una brecha de energía  $E_g$  ceca de 1.38 ( $\pm 0.02$ ), indicando que este compuesto tiene buenas características a utilizarse como capa absorbente en celdas solares tipo película fina.

---

**ESTUDIO AB-INITIO DE LA ESTRUCTURA Y PROPIEDADES ELECTRÓNICAS DEL  $Zr_xAl_{1-x}N$  WURTZITA**

**Estudiante:** Gene Elizabeth Escorcía Salas

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

El  $Zr_xAl_{1-x}N$  es un nuevo material que ha despertado gran interés por su posibilidad de ser aplicados en dispositivos electrónicos que deban desempeñarse a altas temperaturas y presiones. Estos nitruros han mostrado gran estabilidad, dureza y pueden ser capaces de trabajar a altas frecuencias. Por esta razón en el presente trabajo hemos calculado las propiedades estructurales y electrónicas del nuevo compuesto  $Zr_xAl_{1-x}N$  en su fase wurtzita para  $x = 0.00$ ,  $x = 0.25$ ,  $x = 0.50$ ,  $x = 0.75$  y  $x = 1.00$ . El estudio se basa en la teoría de la densidad funcional, DFT, y el método de ondas planas aumentadas y linealizadas, FP-LAPW, para calcular las propiedades del cristal. A partir de la curva de energía de cohesión contra el volumen de la celda unitaria para cada concentración  $x$ , concluimos que las propiedades estructurales varían con la  $x$ . La constante de red obedece de manera aproximada la ley de Vegard, y basándonos en la relación de dispersión vemos que las propiedades electrónicas varían sustancialmente con  $x$ .

**CÁLCULO DE LA ENERGÍA DE ENLACE DE LAS BANDAS NITROGENADAS GUANINA-CITOSINA Y ADENINA-TÍMINA. UNA APLICACIÓN DEL MÉTODO SIESTA.**

**Estudiante:** Camilo Andrés Espejo Pabón

**Directora:** Rafael Ramón Rey González, Dr. Sc.

En este trabajo calculamos las energías de interacción y estabilización de los pares de bases nitrogenadas Guanina-Citosina y Adenina-Timina en la configuración Watson-Crick, dentro del marco de la aproximación GGA de la teoría DFT, usando el método SIESTA. Las optimizaciones estructurales son realizadas con el método de los gradientes conjugados sin ligaduras geométricas, permitiendo estructuras no planas para las bases. Usamos un conjunto de base DZP (doble- $\zeta$  más polarización), y para todas las especies químicas el máximo momentum angular es  $l = 3$ . El error por superposición de la base se calculó con la corrección de la función contrapeso tanto para la energía de interacción como para la energía de estabilización. La comparación entre las geometrías y energías obtenidas y aquellas provenientes de cálculos MP2 con correlación indican diferencias del orden del 10 % entre los dos métodos. Sin embargo, tales diferencias dependen dramáticamente del número de proyectores de Kleinman-Baylander involucrados en la forma no local de los pseudopotenciales.

## **DESARROLLO DE UN PROTOTIPO DE ESTACIÓN AUTÓNOMA DE MEDICIÓN AUTOMÁTICA DE RADIACIÓN SOLAR, VELOCIDAD DE VIENTO Y TEMPERATURA AMBIENTE**

**Estudiante:** Nelson Libardo Forero Chacón

**Directora:** Dr.Rer.Nat. Gerardo Gordillo

El objetivo central de la presente tesis es el desarrollo de un prototipo de estación para medición automática de radiación solar, temperatura ambiente, velocidad y dirección del viento; además, se monitorea el desempeño del sistema de módulos solares incorporados a la estación para que pueda operara en forma autónoma. Este desarrollo incluye el diseño, construcción e instalación de la torre donde se han instalado los sensores y los módulos solares. La principal contribución de este trabajo tiene que ver con el desarrollo de

un prototipo de sistema con facilidades para: medición, adquisición y procesamiento de variables ambientales, monitoreo del desempeño del generador solar y transmisión inalámbrica de datos a una estación central, usando Instrumentación Virtual, que es un concepto novedoso el cual permite implementar este tipo de sistemas con un mayor nivel de funcionalidad y a un costo significativamente más bajo que los fabricados usando instrumentación convencional.

El trabajo esta estructurado en cinco capítulos, en los que se analizan los alcances del prototipo de estación desarrollada en sus distintas fases. El primer capítulo incluye detalles de los aspectos que motivaron y justificaron el trabajo realizado, los cuales tienen que ver con la importancia que para el país tienen en general las energías alternativas y en particular la evaluación del recurso solar y eólico del país, ya que la construcción de bases de datos con información confiable de estas variables, permitirá identificar los sitios más adecuados para la instalación en el país de plantas de generación eléctrica a través de módulos solares y aerogeneradores. En este contexto se presenta también en este capítulo un panorama general mundial en materia de generación eléctrica, incluyendo el empleo de fuentes alternas de generación de electricidad.

El segundo capítulo incluye aspectos generales y fundamentos para el diseño y la implementación del prototipo de estación. En particular se dan detalles de las características y del funcionamiento de: sensores, sistemas de medición, adquisición, y transmisión de datos, hardware y software usados y del sistema de generación fotovoltaica de potencia eléctrica.

Se describe en particular el sistema de adquisición de datos diseñado e implementado, el cual tiene facilidades para monitorear el generador solar y para medir, adquirir y evaluar estadísticamente los parámetros ambientales mencionados. El funcionamiento del sistema está basado en el concepto de Instrumentación Virtual, concepto no convencional, que elimina las limitaciones a las que los sistemas tradicionales de adquisición de datos están sometidos, lo que adicionalmente hace que su implementación se realice con costos significativamente inferiores a los costos de los sistemas comerciales.

## GaN: V ESTABILIDAD ESTRUCTURAL Y PROPIEDADES ELECTRÓNICAS. ESTUDIO MEDIANTE DFT

**Estudiante:** Rafael Julian González Hernández

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

Se utilizó el método de Ondas Planas Aumentadas y Linealizadas (FP-LAPW) con la Aproximación de Gradiente Generalizado (GGA), dentro del formalismo que provee la Teoría del Funcional Densidad (DFT) para estudiar las propiedades estructurales y electrónicas del  $\text{Ga}_{1-x}\text{V}_x\text{N}$ , en las estructuras NaCl (configuración más estable para el VN) y wurtzita (configuración más estable para el GaN). Optimizamos el valor de la relación  $c/a$  y el parámetro interno  $u$ ; y los empleamos para calcular las propiedades del estado base del  $\text{Ga}_{1-x}\text{V}_x\text{N}$  como el volumen de equilibrio, la constante de red, la energía de cohesión, el modulo de volumen y su derivada respecto a la presión. Además como el estudio se realizó para diferentes concentraciones  $x$  de Vanadio ( $x=0; 0,25; 0,50; 0,75; 1$ ), se determinó que la constante de red cumple con la ley empírica de Vegard respecto de la concentración.

Encontramos que para concentraciones menores a  $\sim 75\%$  de V, la estructura más favorable es la wurtzita, mientras que a concentraciones mayores a  $\sim 75\%$  de V, la estructura más favorable es la NaCl. Además observamos que para concentraciones mayores a  $\sim 70\%$  de V se presenta una transición de fase de wurtzita a NaCl. En el estudio de las características electrónicas se determinó las relaciones de dispersión (estructura de bandas) y las densidades de estado (DOS), para la configuración de equilibrio y sus comportamientos bajo presión, encontrando una tendencia metálica en la mayoría de los casos.

**SIMULACIÓN DE LA SINAPSI INHIBITORIA  
MEDIADA POR GABA UTILIZANDO AUTÓMATAS  
CELULARES**

**Estudiante:** Oscar Javier Avella González

**Director:** José Daniel Muñoz Castaño Dr. Rer. Nat.

El trabajo describe el proceso de difusión e interacción de GABA en una sinapsis inhibitoria, se producen los perfiles de corriente MIPSC utilizando un autómata 3D de difusión y se porta información a la discusión sobre las causales de la variabilidad en la intensidad de los MIPSC, tema de discusión abierto.

**ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ELECTRONICAS  
DE UN CRISTAL MONODIMENSIONAL USANDO EL  
MODELO DE KRONING-PENNEY**

**Estudiante:** Luis Elvis Cano Fernández

**Director:** Fabio Enrique Fajardo Tolosa

En este trabajo se estudia el modelo de Kroing-Penney para un cristal mono dimensional. La energía de los electrones se representa mediante una relación de dispersión  $E(k)$ . Se llega a esta relación de dispersión tanto analítica como numéricamente. Se mostró el efecto de las variaciones de los parámetros  $V_o$  y  $L$  para los potenciales de Mathieu y Kroing-Penney en las bandas de energía, densidad de estados y dependencia del gap de energía. Mediante métodos numéricos se encontró el valor de la masa efectiva para el modelo de Kroing-Penney en el caso límite de aproximación de deltas de Dirac, obteniendo el valor de 1.23 veces la masa del electrón libre.

## ESTUDIO DE LAS PROPIEDADES ESTRUCTURALES DEL ESTAÑO MEDIANTE PRIMEROS PRINCIPIOS

**Estudiante:** Nasly Yanira Martínez Velasquez

**Director:** Jairo Arbey Rodríguez Marínez

Se realizó un estudio de las propiedades estructurales del estaño mediante primeros principios utilizando el método LAPW con la aproximación de Gradiente Generalizado (GGA) en el marco de la Teoría DTF (Density Functional Theory). Se hallaron datos estructurales (constantes de red, módulo de Bulk, entre otros), graficándose energía de cohesión en función del volumen de la red, los puntos obtenidos se ajustaron con la ecuación de estado de Murnaghan. El trabajo permitió determinar que tipo de transición ocurre de manera natural al estaño al variar la presión. Con el valor de la constante de red mínima obtenida para cada fase en la configuración más estable se calculó la estructura de bandas de energía, comparándose los valores obtenidos de constante de red y módulo de Bulk con los valores experimentales. La transición de fase más probable del estaño es de la fase diamante ( $\alpha - Sn$ ) a la fase beta ( $\beta - Sn$ ) pasando de un carácter semi-metálico a uno metálico a  $\sim 0.61$  Gpa.

## DECOHERENCIA Y ENTREVERAMIENTO EN CAVIDADES ÓPTICAS

**Estudiante:** Jesús Herazo Warnes

**Director:** Karen Fonseca Romero, Dr. Sc.

Se analiza la dinámica de uno y dos átomos acoplados a un modo del campo electromagnético en una cavidad con pérdidas, en

el régimen dispersivo. Se calcula el hamiltoniano efectivo para dos átomos en dicho régimen. Se emplean técnicas de álgebras de Lie para hallar expresiones analíticas exactas para el operador densidad y las entropías linealizadas correspondientes de todos los sistemas y subsistemas involucrados. En el caso de un átomo de dos niveles interactuando con un modo del campo electromagnético se muestra que, si el campo se prepara en un estado coherente, es posible emplear la concurrencia para cuantificar el entrelazamiento entre ambos subsistemas.

## **MODOS DE VIBRACIÓN ATÓMICA DE UNA RED LINEAL APLICADA A UN CUASICRISTAL**

**Estudiante:** Johan Michel Rincón Corredor

**Director:** Fabio Fajardo

En este trabajo se estudian las vibraciones de cadenas atómicas lineales monoatómicas, diatómicas, desordenadas y cuasicristalinas. En cada caso se realizaron variaciones en las condiciones iniciales de movimiento como la longitud, la razón de masas y la concentración de especies atómicas, para obtener la densidad acumulada de modos por átomo y a partir de ella analizar las principales características de las frecuencias de vibración permitidas y prohibidas para cada cadena. Finalmente se comparan la densidad acumulada de modos por átomo de las cadenas atómicas lineales, encontrando que las vibraciones en un cuasicristal son muy diferentes a las que se presentan en una red periódica ordenada y en una red desordenada.

## EFECTO DEL DESORDEN EN LA CONDUCTIVIDAD TÉRMICA Y COEFICIENTE DE TRANSMISIÓN DE UNA CADENA LINEAL DE ÁTOMOS

**Estudiante:** Oscar Yesid Mariño Beltrán

**Director:** Fabio Fajardo

En el presente trabajo se analiza el efecto que tiene el desorden en la conducción de energía para cadenas lineales de átomos. Se varían algunos parámetros físicos de la cadena como: número de átomos, concentración de impurezas, constantes de acoplamiento y la energía del electrón incidente, con el fin de determinar que tanto influyen en la conductividad térmica y el coeficiente de transmisión. Se utiliza el método de la Matriz de transferencia para llegar a las expresiones que permiten calcular la conductividad térmica y el coeficiente de transmisión. Se encuentra que el desorden en cadenas lineales de átomos genera la aparición de modos localizados, los cuales afectan el transporte de energía y las propiedades de conducción.

## PREPARACIÓN Y ESTUDIO DE PROPIEDADES DE TRANSPORTE ELÉCTRICO EN PELÍCULAS DELGADAS DE $\text{Cu}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$ (CIGS)

**Estudiante:** Fredy Giovanni Mesa Rodríguez

**Director:** Gerardo Gordillo

Películas delgadas de  $\text{Cu}_{1-x}\text{Ga}_x\text{Se}_2$  (CIGS) fueron preparadas por evaporación a través de procesos en dos y tres etapas. El efecto de las condiciones de preparación y de composición química sobre las propiedades ópticas y eléctricas de las películas de CIGS fue investigado mediante medidas de transmitancia espectral y difracción

de rayos-x. Adicionalmente el estudio de mecanismos de transporte eléctrico fue determinado a través de medidas de resistividad y coeficiente Hall en función de la temperatura. Las muestras de CIGS estudiadas tienen un coeficiente de absorción del orden de  $10^4 \text{ cm}^{-1}$  y valores de gap que varían entre 1.04 y 1.72 eV. El estudio mostró que la resistividad disminuye con el incremento de la temperatura. En muestras crecidas en dos etapas se observan conductividades mayores atribuidas a capas superficiales de  $\text{CuSe}_2$ , corroboradas por difracción de rayos x utilizando la técnica de haz rasante. Las propiedades eléctricas de este tipo de muestras son afectadas por dos mecanismos de transporte: "hopping de rango variable" ( $T < 250 \text{ K}$ ) y estados extendidos ( $T > 250 \text{ K}$ ). Sin embargo muestras de CGS crecidas en dos etapas limitadas por efectos de frontera de grano. Los resultados muestran que películas de CIGS presentan una concentración de portadores del orden  $10^{16}$ - $10^{19} \text{ cm}^{-3}$ .