

Abstracts Book Workshop on Processing Physic-Chemistry Advanced

Semiconductores

Superconductividad

Materiales Nanoestructurados:
Modelado, Simulación y
Diagnóstico

Catálisis, Superficies

2nd WPPCA
4-8 April 2016



Súper Computación y
Cálculo Científico UIS

Carlos Leonardo Beltrán Rios
Coordinador 2nd WPPCA

Ely Dannier V. Niño
Editor y Coordinador de Diagramación

Carlos Leonardo Beltrán Rios
Diseño Carátula

Sergio Gélvez
Diseño Web

Carlos Barrios Jaimés
Programación Web

Información Dirección Postal de la Memoria

Ely Dannier V. Niño
Laboratorio de Física y Tecnología del Plasma y Corrosión - FITEK
Universidad Industrial de Santander - UIS
Carrera 27 Calle 9. PBX +57 7 634 40 00 Ext. 1057
Bucaramanga – Santander - Colombia
E-mail: wppca2@gmail.com - imrmpt@gmail.com

Copyright © 2016 UIS – FACULTAD DE CIENCIAS, ESCUELA DE FISICA. Libro de Resúmenes del Segundo Workshop en Procesamiento Físico-Químico Avanzado, ISSSN xxxx-xxxx (en trámite). Ésta es una publicación del Workshop en Procesamiento Físico-Químico Avanzado - WPPCA. La responsabilidad de los resúmenes publicados compete a los autores mismos.

Directivas Universidad Industrial de Santander

Hernán Porras Díaz
Rector

Gerardo Latorre Bayona
Vicerrector Administrativo

Darío Yesid Peña Ballesteros
Vicerrector de Investigación y Extensión

Gonzalo Alberto Patiño Benavides
Vicerrector Académico

David Alejandro Miranda Mercado
Decano Facultad de Ciencias

Jorge Humberto Martínez Tellez
Director Escuela de Física

Harold Paredes Gutiérrez
Director Grupo de Investigación FICOMACO

Comité Organizador Local

Carlos Leonardo Beltrán Ríos (Coordinador)
Harold Paredes Gutiérrez
Carlos Jaime Barrios
Ely Danier V. Niño

Comité Académico Nacional

- José José Barba Ortega
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá
- Jairo Arbey Rodríguez Martínez
Universidad Nacional de Colombia, Bogotá
- Rafael González
Universidad del Norte, Barranquilla
- Javier Antonio Montoya
Universidad de Cartagena, Cartagena
- José Sierra
Universidad del Magdalena, Santa Marta
- Ederley Vélez Ortiz
Universidad de Medellín, Medellín
- Julián David Correa
Universidad de Medellín, Medellín
- Carlos Leonardo Beltrán Ríos
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Harold Paredes Gutiérrez
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Carlos Jaime Barrios
Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga
- Jesús David González Acosta
Universidad del Magdalena, Santa Marta

Comité Académico Internacional

- Eduardo Ariel Menendez Proupin
Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile
- Felipe Gonzalez Cataldo
Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile
- Julibeth Martínez
The Dow Chemical Company, Estados Unidos
- Antonio Rivera
Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España
- Ely Dannier V. Niño
Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España

Conferencistas Invitados Nacionales e Internacionales

- ✓ Antonio Rivera
Rusia Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España
- ✓ Julibeth Martínez
The Dow Chemical Company, Estados Unidos
- ✓ Eduardo Ariel Menendez Proupin
Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile
- ✓ Felipe Gonzalez Cataldo
Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile
- ✓ Javier Antonio Montoya
Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

Contenido

Conferencista Magistral Invitado	7
Daño por irradiación en wolframio	8
Alta excitación electrónica en sílice amorfa.....	9
Cálculo de los coeficientes de velocidad en sistemas de polimerización en emulsión utilizando cálculos basados en cuántica y la teoría del estado de transición (TST) y el desarrollo de la relación cuantitativa estructura-actividad (QSAR)	11
Calculo de las propiedades ópticas de los tintes moleculares utilizando la teoría de la densidad funcional dependiente del tiempo (TDDFT) y el desarrollo de la relación cuantitativa estructura-propiedad (QSPR).....	13
Cálculos ab-initio de energía libre de la solubilidad de la sílice en hidrógeno metálico y aplicación a núcleos de planetas gigantes	15
Curva de fusión del SiO ₂ a altas presiones: implicaciones en los gigantes gaseosos y súper-Tierras.....	16
Simulación de los defectos intrínsecos en CdTe: interacción de los efectos de tamaño y error brecha	17
Búsqueda estructural de materiales usando ab-initio, desde temperatura cero a finita	19
Cuanto de flujo magnético en superconductores.....	20
Densidad de corriente y densidad de estados en semiconductores magnéticos diluidos nanoestructurados	21
Estudio DFT sobre heteroestructuras de grafeno	22
Importancia de las bases de datos de ácidos nucleicos para análisis bioinformáticos enfocados a la genómica.....	23
Ponente.....	25
Sustitución de Bi por Mg en la sal de roca y en la wurtzite de MgO: un estudio basado en DFT	26
Búsqueda estructural imparcial de pequeños agregados de cobre con DFT	27
DFT aplicada a la absorción y difusión del carbono en la superficie de wurtzite GaN(0001)	28
Cálculos teóricos sobre la estructura, termodinámica, y las propiedades electrónicas del ZrC	29
Estimación de la carga iónica de especies metálicas y no metálicas en una descarga eléctrica a través de una aplicación web.....	30
Estimación de la concentración de iones implantados en sustratos sólidos por medio de una aplicación web.....	31
Estabilización de AuN _x con átomos intersticiales de nitrógeno: un estudio de la teoría funcional de la densidad	32
Predicción teórica de las propiedades estructurales, optoelectrónicas y termodinámicas de los compuestos V _x Al _{1-x} N.....	33
Estudio estructural de las aleaciones de almacenamiento hidrógeno basadas en TiCr usando el método de Rietveld	34
Estudio ab-initio de las propiedades electrónicas y magnéticas de ZnO codopado con (Ga, Co).....	35
Estudio de primeros principios sobre las energías de formación de Ga _{1-x} Cr _x As.....	36
Investigación de las propiedades estructurales y electrónicas de las intercapas de VN/AlN/VN y AlN/VN/AlN basadas en calculos DFT	37
Fase relativa y propiedades físicas de las multicapas de CrN/AlN: estudio DFT	38
Mapeo confocal Raman de óxido formado térmicamente in Ti6Al4V ELI	39

Caracterización de escamas ventrales de pieles de serpientes para la fabricación de superficies determinísticas bio- inspiradas para propósitos tribológicos	40
Ocupación electrónica del sistema medio-metálico $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ con la estimación de la interacción en sitio	42
Caracterización de un recubrimiento multifuncional nanoestructurado en Ti6Al4V ELI obtenido mediante oxidación por plasma electrolítico	43
Medición del incremento de la temperatura celular de celda abierta de aleación de Zn-22Al-2Cu	45
Conjugado de L-cisteína para nanopartículas de plata (AgNPs): Estudio de interacción	46
Propiedades, magnéticas, estructurales electrónicas y constantes elásticas de la perovskita compleja $\text{Ba}_2\text{TiMnO}_6$ por medio de DFT	47
Estudio de las propiedades electrónicas de la estructura y característica magnética de la perovskite compleja A_2NiMoO_6 ($\text{A}=\text{Sr}, \text{Ba}$) por medio de calculos de primeros principios	48
Caracterización de distribución de fases mediante Raman confocal y microscopia electrónica de barrido de un recubrimiento osteoconductor de $\text{HA-nZrO}_{2-n}\text{Ag}$ (EN) obtenido por proyección térmica por plasma	49
Las más estables monocapas de (111)-Pt (fcc) sobre grafeno: un estudio del método de primer principio GGA+U	51
Estudio de la teoría funcional de la densidad acerca de la adsorción de átomos de Li y Si sobre grafeno	53
Propiedades magnéticas y electrónicas por medio de calculos de primeros principios de nuevos materiales basados en la adsorción de V, Co y Ni sobre grafeno	55
Adsorción y difusión lateral de átomos de C sobre la superficie de wurtzite (0001)-AlN	57
Estudio funcional de la densidad acerca de la adsorción de átomos de carbono sobre la superficie hexagonal (0001) BN	59
Propiedades estructurales y electrónicas de nuevos materiales bidimensional: estudio DFT	61
Un estudio de química cuántica del efecto inhibitor de las especies que contienen nitrógeno en la adsorción de moléculas poliaromáticas sobre un sitio ácido de Brønsted	62
Análisis numerico de modelos de celda multipartícula para aleaciones de magnesio (Zc71) reforzados con partículas (SiC).....	63
Simulación de factores de concentración de esfuerzos en discontinuidades combinadas sobre placas planas	64
Simulación Monte Carlo de las propiedades ferroeléctricas de películas delgadas de doble perovskita multiferroica ($\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$).....	66
Caracterización termomecánica de un material compuesto de matriz de polietileno de alta densidad reforzado con nanotubos de titanato	67

Conferencista Magistral Invitado

Invited Keynote Speaker

Daño por irradiación en wolframio

Irradiation damage in wolfram

A Rivera¹

¹ Área de Ingeniería Nuclear, Departamento de Ingeniería Energética, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales (ETSII), Universidad Politécnica de Madrid (UPM)

E-mail: antonio.rivera@upm.es

Resumen. El wolframio se considera un material prometedor para futuras plantas de fusión nuclear, a pesar de que en su forma poli-cristalina convencional no es capaz de soportar las condiciones de irradiación pulsada esperadas. El mayor problema reside en el efecto perjudicial de la retención de gases en defectos inducidos por irradiación. Las fronteras de grano juegan un importante papel en la evolución del sistema de defectos. Con la ayuda del código MMonCa, basado en métodos de Monte Carlo cinético de objetos (OKMC) y una apropiada parametrización, hemos modelado un buen número de nuevos experimentos llevados a cabo en distintas condiciones de irradiación con hidrógeno y helio en material virgen y pre-dañado, tanto en muestras poli-cristalinas como en muestras nano-estructuradas. MMonCa ha resultado ser una potente herramienta no solo para comprender el sistema de defectos como para hacer predicciones útiles de cara al diseño de materiales. En esta presentación, se mostrará el papel de los flujos iónicos, la diferencia entre hidrógeno y helio y el papel de la nanoestructura en muestras de wolframio bajo irradiación.

Abstract. Tungsten is considered a promising material for future nuclear fusion plants, although its conventional poly-crystalline form is not capable of withstanding the expected conditions of pulsed irradiation. The biggest problem is the detrimental effect of gases retention in irradiation-induced defects. Grain boundaries play an important role in the evolution of defects system. With the help of MMonCa code, based on methods Monte Carlo kinetic of objects (OKMC) and an appropriate parameterization, we have modeled a number of new experiments carried out under various conditions of irradiation with hydrogen and helium into virgin material and pre-damaged, as well as poly-crystalline samples as in nano-structured samples. MMonCa has proven to be a powerful tool not only to understand the defects system as to make useful predictions facing the design of materials. In this presentation, is showing the role of ionic fluxes, the difference between hydrogen and helium and the role of nanostructure in tungsten samples under irradiation.

Alta excitación electrónica en sílice amorfa

High electronic excitation in amorphous silica

A Rivera¹

¹ Área de Ingeniería Nuclear, Departamento de Ingeniería Energética, Escuela Técnica Superior de Ingenieros Industriales (ETSII), Universidad Politécnica de Madrid (UPM)

E-mail: antonio.rivera@upm.es

Resumen. La alta excitación electrónica en materiales no metálicos produce una miríada de procesos: ionización, dispersión de portadores, difusión de portadores, formación de excitones, recombinación Auger, decaimiento no radiativo de excitones seguidos por procesos térmicos tales como ablación, difusión de calor y reordenamiento atómico. Falta todavía una descripción completa de los procesos físicos subyacentes. Se están llevando a cabo esfuerzos para simular la evolución electrónica y el subsiguiente acoplo a la red atómica, principalmente en el campo de los láseres intensos. Para ello se utilizan modelos cinéticos, aproximaciones Monte Carlo y códigos hidrodinámicos.

En el caso de la irradiación con iones de energías $>0.1\text{MeV/amu}$, se producen modificaciones permanentes inducidas por la alta excitación electrónica. Esto generalmente ocurre por encima de un umbral de energía y afecta a una región (traza) de dimensiones nanométricas alrededor de la trayectoria del ion. Se han propuesto varias descripciones fenomenológicas (con frecuencia contradictorias) para explicar la formación de trazas, e.g., modelo de dos temperaturas, explosión coulombiana, decaimiento no radiativo de excitones. Alternativamente, se han empezado a emplear modelos atomísticos para describir la evolución de la red bajo irradiación iónica.

En esta presentación, se describirá un método sencillo basado en un modelo atomístico para tener en cuenta la energía transferida desde el sistema electrónico a la red. El modelo es fácilmente aplicable a una gran variedad de energías y velocidades iónicas. Validaciones directas con experimentos prueban la bondad del método así como su carácter predictivo.

Abstract. The high electronic excitation in nonmetallic materials produces a myriad of processes: ionization, carriers dispersion, diffusion carrier, formation of excitons, recombination Auger, not radiative decay of excitons followed by thermal processes such as ablation, heat diffusion and atomic rearrangement. still lack a complete description of the underlying physical processes. They are making efforts to simulate the electronic evolution and subsequent coupling to the atomic lattice, mainly in the field of intense lasers. For this is use kinetic models, Monte Carlo Approximation and hydrodynamic codes.

In the case of irradiation with energy ions $>0.1\text{MeV/amu}$ are produced permanent modifications induced by high electronic excitation. This usually occurs above of an energy threshold and affects a region (trace) of nanometric dimensions around the ion trajectory. Have proposed various phenomenological descriptions (often contradictory) to explain the formation of traces, e.g., two-temperature model, Coulomb explosion, no-radiative decay of excitons. Alternatively, they have begun to use atomistic models to describe the evolution of the lattice under ionic irradiation.

In this presentation, a simple method based on an atomistic model to take into account the energy transferred from the electronic system to the lattice will be described. The model is readily applicable to a great variety of energies and ionic velocities. Validations direct with experiments prove the goodness of the method and its predictive nature.

Cálculo de los coeficientes de velocidad en sistemas de polimerización en emulsión utilizando cálculos basados en cuántica y la teoría del estado de transición (TST) y el desarrollo de la relación cuantitativa estructura-actividad (QSAR)

Calculation of rate coefficients in emulsion polymerization systems using quantum based calculations and transition state theory (TST) and development of quantitative structure-activity relationships (QSAR)

J Martínez¹

¹ The Dow Chemical Company, USA

E-mail: jmmartinez1@dow.com

Resumen. Acrilatos, metacrilatos y acetatos son monómeros importantes de vinilo, utilizados ampliamente por la industria para la producción de materiales poliméricos en numerosas aplicaciones. Materiales importantes son fabricados con estos monómeros incluyen caucho sintético, adhesivos, aglutinantes, revestimientos de papel, modificadores de cemento y las pinturas a base de agua. Los monómeros de vinilo se polimerizan por reacciones de radicales libres y se llevan a cabo principalmente a través de la polimerización en emulsión, la cual consiste en una emulsión tensioactiva estabilizada de aceite-en-agua. El mecanismo de polimerización por radicales libres generalmente aceptado implica tres pasos secuenciales: iniciación, propagación y terminación. La iniciación tiene lugar principalmente en la fase acuosa. Las reacciones que tienen lugar en la fase acuosa son extremadamente importantes en la determinación de la cinética de polimerización. Por lo tanto, se necesita una descripción exacta de las reacciones entre los radicales y moléculas de monómero en fase acuosa para mejorar la comprensión de los materiales resultantes de los procesos de polimerización en emulsión.

La medición del coeficiente de velocidad de las reacciones individuales no es una tarea sencilla. La mecánica cuántica computacional (QM) proporciona una valiosa alternativa que estima las constantes de velocidad, geometrías moleculares y perfiles de reacción. En ésta presentación se discutirá una metodología basada en QM y TST que permite calcular los coeficientes de velocidad por las reacciones entre monómeros de vinilo y radicales de oxígeno centrado encontrados en la fase acuosa de las polimerizaciones en emulsión. Además, un desarrollo QSAR que predice los coeficientes de velocidad como una función de los descriptores moleculares será discutido en detalle.

Abstract. Acrylates, methacrylates, and acetates are important vinyl monomers, widely used in industry for the production of polymeric materials for numerous applications. Important materials made with these monomers include synthetic rubber, adhesives, binders, paper coatings, cement modifiers, and water-based paints. Vinyl monomers are polymerized by free-radical reactions, carried out primarily through emulsion polymerization, consisting of a surfactant-stabilized oil-in-water emulsion. The generally accepted free-radical polymerization mechanism involves three sequential steps: initiation, propagation, and termination. Initiation takes places mainly in the aqueous phase.

Reactions taking place in the aqueous phase are extremely important in determining the kinetics of polymerization. Therefore, an accurate description of the reactions between radicals and monomer molecules in aqueous phase is needed to improve the understanding of the materials resulting from emulsion polymerization processes.

Measuring the rate coefficient of individual reactions is not a straightforward task. Computational quantum mechanics (QM) provides a valuable alternative to estimate rate constants, molecular geometries, and reaction profiles. This presentation will discuss a methodology based on QM and TST to calculate rate coefficients for reactions between vinyl monomers and oxygen-centered radicals found in the aqueous phase of emulsion polymerizations. Additionally, a QSAR developed to predict rate coefficients as a function of molecular descriptors will be discussed in detail.

Calculo de las propiedades ópticas de los tintes moleculares utilizando la teoría de la densidad funcional dependiente del tiempo (TDDFT) y el desarrollo de la relación cuantitativa estructura-propiedad (QSPR)

Calculation of optical properties of molecular dyes using time-dependent density functional theory (TD-DFT) and development of quantitative structure-property relationships (QSPR)

J Martínez¹

¹ The Dow Chemical Company, USA

E-mail: jmmartinez1@dow.com

Resumen. Polarizadores ópticos juegan un papel importante en la pantalla de cristal líquido (LCD) y tecnologías de diodo orgánico de emisión de luz (OLED). Ha habido una creciente demanda de nuevas películas polarizantes con estructura innovadora y espesor de película reducido (por ejemplo, polarizadores revestibles delgados) para aplicaciones en dispositivos móviles, televisores de alta gama, juegos, entre otros. Moléculas de colorante de alto rendimiento con grandes relaciones dicróicas se han buscado durante mucho tiempo después, ya que ellas son claves para lograr altas eficiencias de polarización en un polarizador revestible. Otras propiedades ópticas, tales como birrefringencia, también son cruciales para el desempeño de polarizadores en dispositivos LCD y OLED. Materiales birrefringentes se utilizan actualmente para modificar el estado de polarización de la luz que pasa a través de él, lo que permite observar diferentes contrastes dependiendo del ángulo de visión.

En esta presentación, los métodos TD-DFT serán propuestos como una herramienta valiosa para el cálculo preciso de las propiedades ópticas de los tintes moleculares. La metodología utilizada en el cálculo de la birrefringencia será explicada en detalle y la metodología usada en el desarrollo de un QSPR para relaciones dicróicas de colorantes como una función de los descriptores moleculares también será presentado.

Abstract. Optical polarizers play an important role in liquid crystal display (LCD) and organic light emitting diode (OLED) technologies. There has been an increasing demand for new polarizing films with innovative structure and reduced film thickness (e.g., thin coatable polarizers) for applications in mobile devices, high-end TVs, gaming, among others. High performance dye molecules with large dichroic ratios have been long sought after as they are key for achieving high polarization efficiencies in a coatable polarizer. Other optical properties, such as birefringence, are also crucial for the performance of polarizers in LCD and OLED devices. Birefringent materials are currently used to modify the polarization state of light passing through it, which allows observing different contrasts depending on viewing angle.

In this presentation, TD-DFT methods will be proposed as a valuable tool for the accurate calculation of optical properties of molecular dyes. The methodology used for the calculation of birefringence will

be explained in detail and the methodology used to develop a QSPR for dichroic ratios of dyes as a function of molecular descriptors will also be presented.

Cálculos ab-initio de energía libre de la solubilidad de la sílice en hidrógeno metálico y aplicación a núcleos de planetas gigantes

Ab-initio free energy calculations of the solubility of silica in metallic hydrogen and application to giant planet cores

F González-Cataldo¹, H F Wilson^{2,3} and B Militzer^{2,4}

¹ Grupo de NanoMateriales, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile

² Department of Earth and Planetary Science, University of California Berkeley, Berkeley, USA

³ Virtual Nanoscience Laboratory, CSIRO Materials Science and Engineering, Parkville, Australia

⁴ Department Astronomy, University of California Berkeley, Berkeley, USA

E-mail: fullofmetal@gmail.com

Resumen. Mediante la combinación de simulaciones de dinámica molecular del funcional de la densidad con una técnica de integración termodinámica, se determina la energía libre del hidrógeno metálico y la sílice, SiO₂, a presiones de megabar y a miles de grados Kelvin. Nuestros cálculos de solubilidad ab- initio muestran que la sílice se disuelve en hidrógeno fluido por encima de los 5000K a presiones entre los 10 y los 40mbar, lo cual tiene implicaciones para la evolución de los núcleos rocosos de planetas gaseosos gigantes como Júpiter, Saturno, y una fracción sustancial de los planetas extrasolares conocidos. Nuestros resultados subrayan la necesidad de considerar la erosión y la redistribución de los materiales del nucle en los modelos de evolución de los planetas gigantes, pero ellos también demuestran que el hidrógeno metálico caliente es un buen disolvente a megabares de presión, el cual tiene implicaciones en los experimentos de alta presión.

Abstract. By combining density functional molecular dynamics simulations with a thermodynamic integration technique, we determine the free energy of metallic hydrogen and silica, SiO₂, at megabar pressures and thousands of degrees Kelvin. Our ab initio solubility calculations show that silica dissolves into fluid hydrogen above 5000K for pressures from 10 and 40Mbars, which has implications for the evolution of rocky cores in giant gas planets like Jupiter, Saturn, and a substantial fraction of known extrasolar planets. Our findings underline the necessity of considering the erosion and redistribution of core materials in giant planet evolution models, but they also demonstrate that hot metallic hydrogen is a good solvent at megabar pressures, which has implications for high-pressure experiments.

Curva de fusión del SiO₂ a altas presiones: implicaciones en los gigantes gaseosos y súper-Tierras

Melting curve of SiO₂ at high pressures: implications for gas giants and super-Earths

F González-Cataldo¹, S Davis² and G Gutiérrez¹

¹ Grupo de NanoMateriales, Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile

² Departamento de Plasma Termonucleares, Comisión Chilena de Energía Nuclear, Chile

E-mail: fullofmetal@gmail.com

Resumen. El descubrimiento de alrededor de 2.000 planetas fuera de nuestro sistema solar en los últimos años ha motivado el estudio de su estructura interna y evolución. Modelos para el interior de los planetas son limitados por la composición global y distribución de las especies químicas, y que necesitan incluir las ecuaciones de estado, tales como transiciones de fase y curvas de fusión a alta presión, para perovskitas, magnesiowustitas y silicatos, los cuales se encuentran entre los elementos más comunes en la formación de roca. A continuación, se presenta un estudio de la curva de fusión de la sílice (SiO₂) en el régimen de presión multimegabar (>1000GPa), tal como se obtiene a partir de los primeros principios de las simulaciones de dinámica molecular. Calculamos el punto de fusión de la sílice en las tres fases de alta presión (pyrite-, cotunnite-, y SiO₂ de tipo Fe₂P) utilizando el método Z a diferentes presiones. Encontramos un abrupto alrededor de los 330GPa, lo que significa que la sílice es más difícil de fundir para altas presiones de lo previsto a partir de la extrapolación de la curva de fusión conocida a bajas presiones. El diagrama de fases predicho indica que la sílice podría ser uno de los componentes dominantes en los núcleos rocosos de los gigantes gaseosos, ya que se mantiene sólido en el núcleo de los gigantes gaseosos de nuestro sistema solar. Estos resultados son también relevantes para modelar la estructura interna y la evolución de súper-Tierras masivas.

Abstract. The discovery of nearly 2000 planets outside our solar system in the last years has motivated the study of their inner structure and evolution. Models for planetary interiors are constrained by the bulk composition and distribution of chemical species, and they need to include equations of state, such as phase transitions and melting curves at high pressure, for perovskites, magnesiowustites and silicates, which are among the most common rock-forming elements. Here we present a study of the melting curve of silica (SiO₂) for the multimegabar (>1000GPa) pressure regime, as obtained from first principles molecular dynamics simulations. We calculate the melting point of three high pressure phases of silica (pyrite-, cotunnite-, and Fe₂P-type SiO₂) at different pressures using the Z method. We found an abrupt around 330GPa, meaning that silica is harder to melt for high pressures than previously expected from extrapolation of the melting curve known for lower pressures. The so predicted phase diagram indicates that silica could be one of the dominant components of the rocky cores of gas giants, as it remains solid at the core of our Solar System's gas giants. These results are also relevant to model the inner structure and evolution of massive super-Earths.

Simulación de los defectos intrínsecos en CdTe: interacción de los efectos de tamaño y error brecha

Simulation of intrinsic defects in CdTe: interplay of size effects and gap error

E Menéndez-Proupin¹

¹ Departamento de Física, Facultad de Ciencias, Universidad de Chile, Santiago de Chile, Chile

E-mail: emenendez@uchile.cl

Resumen. Los estados cuánticos y las propiedades termodinámicas de los defectos intrínsecos en CdTe son estudiados por medio de cálculos de la teoría del funcional de la densidad. Se muestra que los efectos del tamaño de las superceldas son particularmente fuertes para algunos defectos. Por ejemplo, una vacancia de Te dentro de una superceldas cúbica de 64-átomos modifica drásticamente la estructura de banda del CdTe, como se muestra en la figura 1, la apertura de la banda prohibida y la perturbación de dispersión de las bandas de valencia y de conducción. Por lo tanto, la supercélula de 64-átomos no puede ser utilizada como un modelo para calcular algunos defectos aislados.

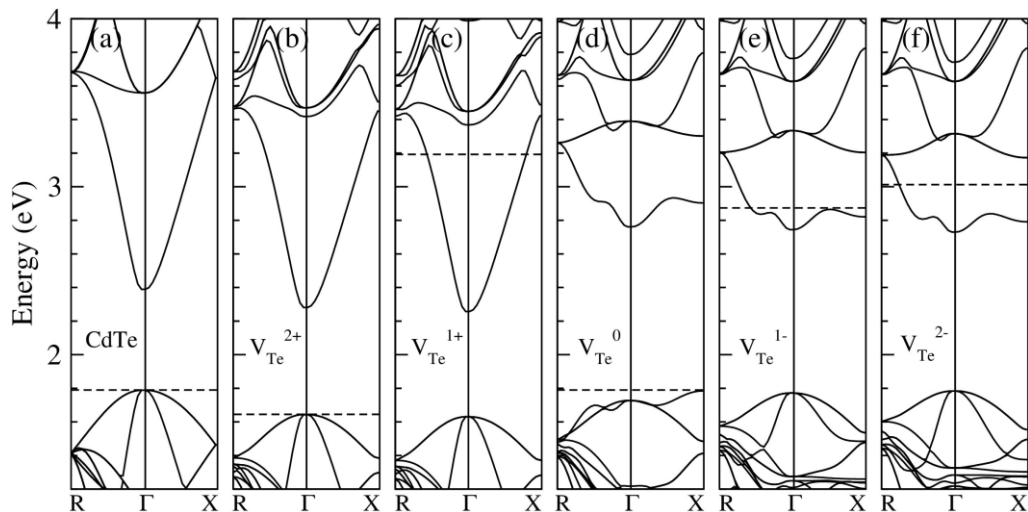


Figura 1. Diagrama de banda calculada (a) con superceldas de 64 y 63 átomos de cristal perfecto y (b)-(f) para vacancia de Te en los estados de carga 2^+ a 2^- .

Las estructuras electrónicas de defectos aislados son recuperadas utilizando una supercelda cúbica de 216 átomos. Tras la creación del defecto en esta supercelda, la estructura de bandas se asemeja a una perturbación de la estructura de banda del cristal perfecto, como se esperaba para un defecto diluido. Sin embargo, si se constata que otros efectos de tamaño, junto con la subestimación de brecha típica de los funcionales LDA/GGA, puede modificar las simetrías de los defectos y las energías de formación. En este trabajo, se reportan los valores corregidos de las energías de formación, incluyendo el tamaño de la supercelda y las correcciones de las cuasipartículas en los bordes de la banda de valencia y de conducción. Se muestra que la interacción de los diferentes efectos de tamaño y el uso de los diferentes

esquemas de corrección es la causa probable de la dispersión en la formación de energías reportadas en la literatura.

Abstract. The quantum states and thermodynamical properties of intrinsic defects in CdTe are studied by means of density functional theory calculations. It is shown that supercell size effects are particularly strong for some defects. For example, a Te vacancy inside a cubic 64-atoms supercell modifies drastically the CdTe band structure, as shown in the Figure 1, opening the bandgap and disturbing the dispersion of the valence and conduction bands. Therefore, the 64-atoms supercell cannot be used as a model to calculate some isolated defects.

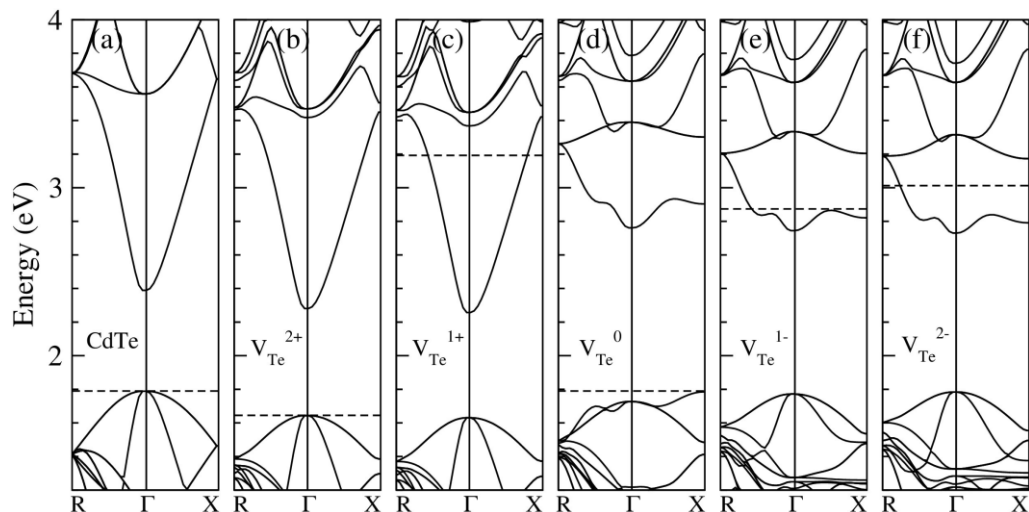


Figure 1. Band diagram computed with 64- and 63-atoms supercell for perfect crystal (a) and for Te vacancy in the charge states 2^+ to 2^- (b) to (f).

The electronic structures of isolated defects are recovered using a cubic 216-atoms supercell. Upon defect creation in this supercell, the band structure resembles a perturbation of the band structure of the perfect crystal, as expected for a diluted defect. However, it is shown that other size effects, together with the gap underestimation typical of the LDA/GGA functionals, can modify the defects symmetries and formation energies. In this work, corrected values are reported for the formation energies, including the supercell size and quasiparticle corrections for the valence and conduction band edges. It is shown that the interplay of different size effects and the use of different correction schemes is the probable cause of the scattering in formation energies reported in the literature.

Búsqueda estructural de materiales usando ab-initio, desde temperatura cero a finita

Ab-initio structural search in materials, from zero to finite temperature

J A Montoya^{1,2}

¹ Instituto de Matemáticas Aplicadas, Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

² Abdus Salam International Centre for theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italia

E-mail: jmontoyam@unicartagena.edu.co

Resumen. Existen varios métodos para abordar el problema de tratar de encontrar la verdadera estructura de un material, sólo a partir del conocimiento de sus constituyentes atómicos y de las condiciones termodinámicas a la cual es expuesto. Aquí identifico dos principales familias de técnicas que son dedicadas a la solución de este problema: 1) los métodos a temperatura cero y 2) los métodos a temperatura finita. En esta trabajo, una visión general de estos dos tipos de técnicas son presetadas con ejemplos a lo largo de casos donde uno o el otro ha sido aplicado con éxito en el marco de la ciencia de alta presión.

Abstract. Several methods exist to approach the problem of trying to find the true structure of a material, starting only from the knowledge of its atomic constituents and the thermodynamic conditions to which it is exposed. Here I identify two main families of techniques that are devoted to solving this problem: 1) Zero temperature methods and 2) Finite temperature methods. In this talk, an overview of these two types of techniques is presented along with examples of cases where one or the other has been applied successfully in the framework of high pressure science.

Cuanto de flujo magnético en superconductores

Magnetic flux quantum in superconductors

J J Barba-Ortega¹

¹ Grupo de Física Mesoscópica, Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

E-mail: jjbarbao@unal.edu.co

Resumen. En un material superconductor de tipo II, el campo magnético puede penetrar en forma de vórtices, llevando cada uno solo un fluxoide cuántico, dispuestos en una red hexagonal, llamado estado de Shubnikov-Abrikosov y toman lugar entre los primeros y segundos campos magnéticos críticos. En el marco del primer campo magnético está presente el estado Meissner. Para muestras mesoscópicas las propiedades magnéticas pueden presentar propiedades nuevas y muy interesantes debido al efecto de proximidad de las condiciones de contorno in-homogéneas y a la presencia de barreras, defectos y/o impurezas. Las configuraciones de pares de Cooper en un superconductor mesoscópico con una barrera/orificios/pilar/zanja son calculadas dentro de las ecuaciones no lineales de Ginzburg Landau. Prevedemos que la nucleación dentro de la muestra de un solo, múlti vórtice y estados de vórtice gigante depende en gran medida de la geometría y la naturaleza de la imperfección. La geometría de flujo cuántico no convencional ocurre en el campo magnético determinado.

Abstract. For a bulk type II superconducting material, the magnetic field can penetrate in the form of vortices, each carrying one single quantum fluxoid, arranged in a hexagonal lattice, this so-called Shubnikov-Abrikosov state and takes place between the first and the second critical magnetic fields. Under the first magnetic field is present the Meissner state. For mesoscopic samples the magnetic properties can present new and very interesting properties due the proximity effect of in-homogeneous boundary conditions and the presence of barriers, defects and/or impurities. The Cooper pair configurations in a mesoscopic superconducting with a barrier/holes/pillar/trench are calculated within the nonlinear Ginzburg-Landau equations. We predict that the nucleation of Single, Multi-vortex and Giant-vortex states into the sample depend highly on the geometry and nature of the imperfection. Non-conventional quantum flux geometry occurs at determined magnetic field.

Densidad de corriente y densidad de estados en semiconductores magnéticos diluidos nanoestructurados

Current density and state density in diluted magnetic semiconductor nanostructures

S T Pérez-Merchancano¹, H Paredes Gutiérrez² and J A Zuñiga¹

¹Departamento de Física, Universidad del Cauca, Popayán, Colombia

²Escuela de Física, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: hparedes@uis.edu.co

Resumen. En el presente trabajo estudiamos las componentes de densidad de corriente de espín polarizada en diodos túnel de semiconductores magnéticos diluidos con muestras de diferentes geometrías. Calculamos el resonante $J \times V$ y la densidad de estados. Las curvas de conductancia diferencial son analizadas como funciones de la tensión aplicada y la fuerza potencial magnética inducida por los iones magnéticos.

Abstract. We study in this paper the spin-polarized current density components in diluted magnetic semiconductor tunnelling diodes with different sample geometries. We calculate the resonant $J \times V$ and the density of states. The differential conductance curves are analyzed as functions of the applied voltage and the magnetic potential strength induced by the magnetic ions.

Estudio DFT sobre heteroestructuras de grafeno

DFT study about graphene heterostructures

J A Rodríguez¹

¹ Departamento de Física, Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

E-mail: jairoarbey@gmail.com

Resumen. El grafeno es útil en la nanoelectrónica, la ingeniería o los sistemas biológicos cuando es químicamente modificado o es usado en combinación con otros materiales o elementos. Hoy en día es habitual encontrar, como ejemplo, óxidos de grafeno o interfaces entre grafeno y silicio o metales de transición como níquel, o grafeno como electrodo. Se conoce que la interacción entre el grafeno y níquel se debe a la hibridación entre los d-orbitales del níquel y los pi-orbitales del grafeno, y este material produce un momento magnético. Pero no todo son buenas noticias. Varios problemas aparecen en las interfaces, como el daño en la cristalinidad o de la reacción química local que produce algunos compuestos de níquel y carbono, el dopaje no intencional, la difusión de átomos de carbono, puede resultar en un mal comportamiento o la degradación de ambos comportamientos el electrónico y el magnético. Todas estas posibilidades motivan estudios más profundos sobre el comportamiento de las interfaces de los sistemas de grafeno a escala atómica. En este trabajo se muestran algunos estudios sobre los sistemas de grafeno como el grafeno con silicio, y grafeno con metales de transición 3d como escandio, titanio, vanadio, cromo, cobalto y níquel y otros sistemas de nitruros de grafeno como GaN, AlN y BN. Proponemos algunas estructuras que pueden permitir la existencia estable de estos sistemas de base grafeno.

Abstract. Graphene is useful in nanoelectronics, engineering or biological systems when is chemically modified or is used in conjunction with other materials or elements. Nowadays is usual to find, as example, graphene oxides or interfaces between graphene and silicon or transition metals as nickel, or graphene as electrode. It is known that interaction between graphene and nickel is due hybridization between nickel's d-orbitals and the graphene's pi-orbital, and this material produces a magnetic moment. But not all is good news. Several problems appear at interfaces, as damage in crystallinity or local chemical reaction than produces some nickel and carbon compounds, unintentional doping, diffusion of carbon atoms, can result in poor behavior or degradation of both electronic and magnetic behaviors. All these possibilities motivate deeper studies about the behaviour of the interfaces of graphene systems at atomic level. In this work we show some studies about graphene systems as graphene with silicon, and graphene with 3d-transition metals as scandium, titanium, vanadium, chromium, cobalt and nickel and other graphene-nitrides systems as GaN, AlN and BN. We propose some structures that can permit the stable existence of these graphene-based systems.

Importancia de las bases de datos de ácidos nucleicos para análisis bioinformáticos enfocados a la genómica

Importance of databases of nucleic acids for bioinformatic analysis focused to genomics

F J Martínez Pérez¹

¹ Laboratorio de Genómica de Celomados, Grupo Microbiología y Genética, Unidad de Supercómputo y Calculo Científico, Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: fjmartin@uis.edu.co

Resumen. En las ciencias biológicas el termino Genómica refiere a la parte de la biología que tiene como objetivo el estudio del origen y regulación de la información genética para la generación de un ser vivo y los procesos fisiológicos que ocurren durante su ciclo de vida. Lo anterior, se ha logrado mediante dos áreas que son indivisibles la primera corresponde a los procesos químicos, bioquímicos, moleculares y tecnológicos que permiten obtener la secuencia de ácidos nucleicos que compone a un genoma o su expresión en forma de ácido ribonucleico en toda sus variantes. La segunda pertenece al procesamiento de millones de secuencias que se generan por las técnicas anteriores lo que conlleva, invariablemente, al uso de sistemas de cómputo y supercómputo para poder integrar toda la información nucleotídica y dar una lógica biológica para ser utilizada en cualquier área del saber humano.

Actualmente se tienen más de 345 proyectos de secuenciación de genomas de bacterias, hongos, animales y plantas, además de continuar con el estudio de la regulación del genoma humano. Toda esta información molecular está depositada en bases de datos internacionales la mayoría de ellas públicas y otras no. Pero en muchos casos aún no se tiene evidencia biológica de los productos genómicos de muchas de ellas, por lo que se han realizado aplicaciones bioinformáticas para establecer su posible función. Por lo tanto la fidelidad de la obtención de los datos es el primer elemento para poder realizar una correcta interpretación bioinformática de la muestra genómica a analizar.

En el presente trabajo se muestran y discuten la importancia de la correlación entre la obtención de datos genómicos por los métodos de secuenciación de tercera generación y las implicaciones bioinformáticas que se tienen para la generación de base de datos que permite el análisis de la información genómica sustentada en aspectos biológicos y algoritmos teóricos.

Abstract. In the biological sciences the term Genetics refers to the part of biology that aims at studying the origin and regulation of genetic information for the generation of a living being and physiological processes that occur during their life cycle. This has been achieved through two areas that are indivisible the first corresponds to the chemical, biochemical, molecular and technological processes that result in the nucleic acid sequence that comprises a genome or its expression in the form of ribonucleic acid in all its variants. The second belongs to the processing of millions of sequences generated by the above techniques which lead invariably to the use of computer systems and supercomputer to integrate all the nucleotide information and provide a biological logic to be used in any area of knowledge human.

Currently there are more than 345 projects sequencing genomes of bacteria, fungi, animals and plants, in addition to continuing the study of the regulation of the human genome. All this molecular information is deposited in international databases most of them public and not others. But in many cases still not have biological evidence of many products genomic, so have been conducted to establish bioinformatics applications its possible function. Therefore the accuracy of the data collection is the first element to make a correct interpretation bioinformatics of sample genomics to analyze.

In this work are shown and discussed the importance of the correlation between obtaining genomic data by sequencing methods third generation and bioinformatic implications are taken for generating database that allows the analysis of genomic data supported in biological and theoretical algorithms.

Ponente

Keynote

Sustitución de Bi por Mg en la sal de roca y en la wurtzite de MgO: un estudio basado en DFT

Substitution of Bi for Mg in rock salt and wurtzite MgO: a study based on DFT

P Abdel Rahim^{1,2}, J A Rodriguez Martinez², M G Moreno-Armenta³ and C E Deluque Toro¹

¹ Universidad Universidad Antonio Nariño, Santafé de Bogotá, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

³ Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

⁴ Universidad de la Guajira, Riohacha, Colombia

E-mail: gabdelrahim@uan.edu.co

Resumen. Las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas del nuevo material Bi:MgO, el cual es MgO con algunas sustituciones de átomos de Mg con átomos de Bi, son presentados. Los cálculos se llevaron a cabo para la estructura de la sal de roca (NaCl) y la estructura del wurtzite (WZ). Los cálculos fueron realizados usando los primeros principios del método pseudo-potencial dentro del marco de la teoría funcional de la densidad del spin-polarizado (DFT) por medio del Código Quantum Espresso. Efectos de intercambio y correlación fueron tomados en cuenta el usando la aproximación del gradiente generalizado (GGA) implementado en el funcional de Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE). Fue empleado los pseudo-potenciales Ultrasoft. Los cálculos de energía en función del volumen se llevaron a cabo, y estos datos fueron ajustados a la ecuación de estado de Murnaghan con el fin de determinar el volumen de equilibrio, la energía mínima, y el módulo volumétrico y su derivado. La comparación entre la energía mínima de Bi:MgO en la sal de roca y estructuras de Wurtzite determinaron la fase más estable. La observación de las curvas de energía vs volumen mostró si una transición de fase es posible. Presión en la transición puede ser calculada a partir de las curvas y datos. A partir de estos cálculos, fue determinado el enrejado constante y el momento magnético de la celda unitaria. Las propiedades electrónicas, así como la densidad de estados y las bandas de energía electrónicas, son mostradas y analizadas.

Abstract. Structural, electronic, and magnetic properties of the new material Bi:MgO, which is MgO with substitution of some Mg atoms with Bi atoms, are presented. Calculations were carried out for the rock salt structure (NaCl) and the wurtzite structure (WZ). Calculations were performed using the first-principles pseudo-potential method within the framework of spin-polarized density functional theory (DFT) by means of the Quantum-Espresso Code. Exchange and correlation effects were taken into account using the generalized gradient approximation (GGA) implemented in the Perdew-Burke-Ernzerhof functional (PBE). Ultrasoft pseudo-potentials were employed. Calculations of energy versus volume were carried out, and these data were fit to Murnaghan's equation of state in order to determine equilibrium volume, minimum energy, and bulk modulus and its derivative. Comparison between the minimum energy of Bi:MgO in rock salt and wurtzite structures determined the most stable phase. Observation of the curves of energy vs. volume showed whether a phase transition is possible. Pressure for the transition can be calculated from the plots and data. From these calculations, lattice constant and magnetic moment of the unit cell were determined. The electronic properties, as well as the density of states and the electronic energy bands, are shown and analyzed.

Búsqueda estructural imparcial de pequeños agregados de cobre con DFT

Unbiased structural search of small copper clusters within DFT

B H Cogollo Olivo¹, N Seriani² and J A Montoya¹

¹ Universidad de Cartagena, Cartagena, Colombia

² Abdus Salam International Centre for theoretical Physics (ICTP), Trieste, Italia

E-mail: bcogollo@unicartagena.edu.co

Resumen. La estructura atómica de pequeños clústeres de Cobre compuestos de 3 a 6 átomos fue estudiada a través de la teoría del funcional de la densidad (DFT) y el algoritmo de Búsqueda Aleatoria. Se encontraron nuevas configuraciones meta-estables cuyas energías son mayores que las de sus correspondientes estados bases por sólo unos pocos meV/átomo, de modo que estas estructuras podrían existir en equilibrio térmico en sistemas que se encuentren a temperatura ambiente o ligeramente superior. Así mismo, evidenciamos que la configuración lineal que ha sido propuesta para Cu_3 es de hecho un máximo energético. Finalmente, pudimos demostrar que el algoritmo de Búsqueda Aleatoria proporciona información cualitativa acerca de las cuencas de atracción de cada estructura dentro del espacio de configuraciones cristalinas.

Abstract. The atomic structure of small clusters of copper compounds 3 to 6 atoms was studied through the Density Functional Theory (DFT) and random search algorithm. new meta-stable configurations whose energies are higher than their corresponding states bases only a few meV/atom, so that these structures may exist in thermal equilibrium in systems that are at room temperature or slightly above were found. Furthermore, we show that the linear configuration that has been proposed for Cu_3 is indeed an energy maximum. Finally, we could show that the algorithm random search provides qualitative information about the basins of attraction of each structure within the space of crystalline configurations.

DFT aplicada a la absorción y difusión del carbono en la superficie de wurtzite GaN(0001)

DFT applied to absorption and diffusion of carbon at GaN(0001) wurtzite surface

M J Espitia Rico¹, M G Moreno-Armenta², N Takeuchi² and J A Rodríguez Martínez³

¹ Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Santafé de Bogotá Colombia

² Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

³ Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

E-mail: mespitiar@udistrital.edu.co

Resumen. Por medio de la teoría funcional de la densidad (DFT), las propiedades estructurales y electrónicas son estudiadas en varios casos de adsorción y difusión de átomos de carbono en la superficie limpia ideal de (0001)-GaN_{2x2} y en su reconstrucción más estable que es el modelo de Northrup, bicapa lateralmente contraída de Ga. La mejor posición, a partir de consideraciones de energía, para adsorber un átomo de C es el centro del hexágono en la primera bicapa, la cual es llamada punto H3, mientras que la peor posición es la T1 que es un C en el átomo de Ga. Un momento magnético de $1\mu_B$ es presentado por la superficie (slab) en la adsorción de H3. Este magnetismo es debido a la hibridación y la polarización de p-C y P-N orbitales alrededor de la energía de Fermi.

Abstract. By means of the Density Functional Theory (DFT), structural and electronic properties are studied for several cases of adsorption and diffusion of carbon atoms on the (0001)-GaN 2x2 clean ideal surface and on its most stable reconstruction which is the Northrup's laterally contracted Ga bilayer model. The best position, from energy considerations, to adsorb one C atom is the center of the hexagon in the the first bilayer, which is called H3 point, while the worst position is T1 which is one C on Ga atom. A magnetic moment of $1\mu_B$ is presented by the slab for the H3 adsorption. This magnetism is due to hybridization and polarization of p-C and p-N orbitals around the Fermi energy.

Cálculos teóricos sobre la estructura, termodinámica, y las propiedades electrónicas del ZrC

Theoretical calculations on the structural, thermodynamic, and electronic properties of ZrC

G P Abdel Rahim Garzón^{1,2}, J A Rodríguez Martínez² and M G Moreno-Armenta³

¹ Universidad Universidad Antonio Nariño, Santafé de Bogotá, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

³ Univerisdad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, México

E-mail: gabdelrahim@uan.edu.co

Resumen. Es bien sabido que ZrC es estable en una fase con una estructura como NaCl, donde estos parámetros de red son $a=8,92\text{Bohr}$, módulo de compresibilidad $B_0=216\text{GPa}$, energía cohesiva $E=-16.043\text{eV}$, y el volumen $V=177.14\text{Bohr}^3$. Transiciones de fase en la estructura ocurren desde el NaCl hasta el CsCl a $P_T\approx 31.62\text{GPa}$ y desde CsCl hasta ZnS a $P_T\approx 10.42\text{GPa}$. Para obtener estos resultados, calculamos las propiedades electrónicas en las estructuras de ZrC tales como el cloruro de sodio (NaCl), cloruro de cesio (CsCl), zincblende (ZnS), wurtzite (WZ), y arseniuro de níquel (NiAs). Utilizamos cálculos de primeros principios dentro del marco de la teoría funcional de la densidad, con el método ondas planas aumentadas y linealizadas con potencial completo (FP-LAPW). Los efectos de intercambio y correlación fueron tratados mediante la aproximación del gradiente generalizado (GGA) implementado como método Perdew-Burke-Ernzerhof.

Abstract. It is well known that ZrC is stable in a phase with a NaCl-like structure, where its lattice parameters are $a=8.92\text{Bohr}$, bulk modulus $B_0=216\text{GPa}$, cohesive energy $E=-16.043\text{eV}$, and volume $V=177.14\text{Bohr}^3$. Phase structure transitions occur from NaCl to CsCl at $P_T\approx 31.62\text{GPa}$ and from CsCl to ZnS at $P_T\approx 10.42\text{GPa}$. In order to obtain these results, we calculated the electronic properties of ZrC in structures such as sodium chloride (NaCl), cesium chloride (CsCl), zinc-blende (ZnS), wurtzite (WZ), and nickel arsenide (NiAs). We used first-principles calculations within the framework of Density Functional Theory, with the Full Potential Linearized Augmented Plane Wave Method (FP-LAPW). The exchange and correlation effects were treated using the Generalized Gradient Approximation (GGA) as implemented in the Perdew-Burke-Ernzerhof-method.

Estimación de la carga iónica de especies metálicas y no metálicas en una descarga eléctrica a través de una aplicación web

Estimation of the ionic charge of metallic and non-metallic species into an electrical discharge through a web application

B R Pérez Gutiérrez¹, F H Vera Rivera¹ and E D V-Niño^{2,3}

¹ Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

² Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

³ Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España

E-mail: borisperezg@ufps.edu.co , deydannv@gmail.com

Resumen. Estimar la carga iónica generada en las descargas eléctricas permitirá conocer con mayor precisión la concentración de iones que se implantan en las superficies de los sólidos metálicos y no metálicos. Por tal motivo, en el presente trabajo de investigación se lleva a cabo el desarrollo de una aplicación web que permita calcular la carga iónica generada en una descarga eléctrica a partir de ciertos parámetros experimentales establecidos en un proceso de implantación iónica realizado en el Reactor JUPITER (Joint Universal Plasma and Ion Technologies Experimental Reactor). El valor estimado de la carga iónica se determinará a partir de los datos adquiridos en un osciloscopio, durante el encendido y el apagado de la descarga eléctrica, que posteriormente serán analizados y procesados. El estudio brindará desarrollos más idóneos con respecto a las aplicaciones de la implantación iónica en los diversos sectores industriales.

Abstract. Estimate the ionic charge generated in electrical discharges will allow to know more accurately the concentration of ions implanted on the surfaces of metallic and nonmetallic solids. For this reason, in this research a web application was developed to allow us to calculate the ionic charge generated in an electrical discharge from the experimental parameters established in an ion implantation process performed in the JUPITER (Joint Universal Plasma and Ion Technologies Experimental Reactor) reactor. The estimated value of the ionic charge will be determined from data acquired on an oscilloscope, during startup and shutdown of electrical discharge, which will then be analyzed and processed. The study will provide best developments with regard to the application of ion implantation in various industrial sectors.

Estimación de la concentración de iones implantados en sustratos sólidos por medio de una aplicación web

Estimate of the concentration of implanted ions in solid substrates using a web application

F H Vera Rivera¹, B R Pérez Gutiérrez¹, H J Dulce Moreno¹ and E D V-Niño^{2,3}

¹ Universidad Francisco de Paula Santander, San José de Cúcuta, Colombia

² Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

³ Universidad Politécnica de Madrid, Madrid, España

E-mail: fredyhumbertovera@ufps.edu.co , deydannv@gmail.com

Resumen. La técnica de Implantación Iónica triDimencional (3DII) es utilizada para modificar la superficie de solidos metálicos mediante descargas eléctricas pulsadas de alto voltaje a bajas presiones. Conocer la densidad de iones implantados en la superficie de un elemento funcional, de una forma más rápida y estimada, permitirá optimizar la técnica de tratamiento superficial. Por tal motivo se realizó el desarrollo de aplicación web que a partir de parámetros experimentales establecidos en un proceso de 3DII, estima la concentración de iones implantados en los sustratos solidos metálicos. El resultado obtenido en el presente trabajo de investigación muestra la viabilidad de la herramienta computacional web en perfeccionar los experimentos de modificación superficial por implantación iónica.

Abstract. The three-dimensional ionic implantation technique (3DII) is used to modify the surface of solid metal by electric discharges pulsed of high voltage at low pressures. Knowing the density of ions implanted in the surface of a functional element, in a faster and estimated way, will help to optimize the surface treatment technique. Therefore a web application was developed which from experimental parameters established in a process 3DII estimates the concentration of ions implanted in solid metal substrates. The results obtained in this research work demonstrate the feasibility of the computational web tool to perfect the experiments of surface modification by ion implantation.

Estabilización de AuN_x con átomos intersticiales de nitrógeno: un estudio de la teoría funcional de la densidad

AuN_x stabilization with interstitial nitrogen atoms: A density functional theory study

J H Quintero¹, R Gonzalez-Hernandez² and A Mariño³

¹ Universidad de Medellín, Medellín, Colombia

² Grupo de Investigación en Física Aplicada, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia

³ Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

E-mail: jhquintero@udem.edu.co

Resumen. Los investigadores han estado estudiando últimamente los nitruros de la serie de metales de transición 4d y 5d como un resultado de la producción experimental de AuN, PtN, CuN. En este trabajo, se utilizó la teoría funcional de la densidad (DFT) implementado en el método pseudopotencial de onda plana para estudiar la incorporación de átomos de nitrógeno en la red cúbica centrada en el cara (fcc) del oro. En primer lugar, tomamos la estructura de oro fcc y gradualmente ubicamos los átomos de nitrógeno en los sitios intersticiales tetraédrico (TH) y octaédrico (OH). AuN estabilizó en: 2OH (30%), 4OH y 4TH (50%), 4OH-2TH (cerca de la estructura wurtzite) y 6TH (60%). Esto nos lleva a pensar que AuN se comporta como un nitruro de metales de transición ya que los átomos de nitrógeno buscan sitios tetraédricos.

Abstract. Researchers have been studying 4d and 5d Series Transition Metal Nitrides lately as a result of the experimental production of AuN, PtN, CuN. In this paper, we used the Density Functional Theory (DFT) implementing a pseudopotential plane wave method to study the incorporation of nitrogen atoms in the face-centered cube (fcc) lattice of gold. First, we took the fcc structure of gold, and gradually located the nitrogen atoms in tetrahedral (TH) and octahedral (OH) interstitial sites. AuN stabilized in: 2OH (30%), 4OH and 4TH (50%), 4OH-2TH (close to the wurtzite structure) and 6TH (60%). This leads us to think that AuN behaves like a Transition Metal Nitride since the nitrogen atoms look for tetrahedral sites.

Predicción teórica de las propiedades estructurales, optoelectrónicas y termodinámicas de los compuestos $V_xAl_{1-x}N$

Theoretical prediction of structural, optoelectronic and thermodynamic properties of $V_xAl_{1-x}N$ compounds

G E Escorcia-Salas¹, E Gutierrez-Senior¹, R González-Hernandez², W López-Pérez² and J Sierra-Ortega¹

¹ Universidad del Magdalena, Santa Marta, Colombia

² Departamento de Física, Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia

E-mail: fisicagutierrez@yahoo.es

Resumen. Las propiedades estructurales, electrónicas, ópticas y termodinámicas de aleaciones de $V_xAl_{1-x}N$ se obtuvieron utilizando cálculos de primeros principios. Los efectos de intercambio y correlación han sido considerados por medio de la aproximación de gradiente generalizado (GGA) con la parametrización Perdew-Burke-Ernzerhof. Dado que los precursores binarios de los compuestos de VN y AlN cristalizan en sal de roca y en wurtzite, respectivamente, se llevaron a cabo los cálculos para las aleaciones ternarias en estas dos fases. El efecto de los parámetros estructurales de V en la composición x (0, 0,25, 0,5, 0,75, 1), las energías de la banda prohibida, las entalpías de la mezcla, los diagramas de fase, la densidad de estados y la estructura de banda fue estudiado. El efecto de la composición atómica de la constante de red, módulo de compresibilidad, y la energía de banda prohibida muestran la dependencia no lineal de la concentración x . Las desviaciones de la constante de red de la ley de Vegard, y las desviaciones de los módulos de compresibilidad y brecha de energía de la concentración de dependencia lineal fue encontrada. El origen físico de la banda prohibida inclinándose en compuestos wurtzita de $V_xAl_{1-x}N$ fue investigado. Un modelo de solución regular fue usado para estudiar la estabilidad termodinámica de $V_xAl_{1-x}N$. La función dieléctrica real e imaginaria, el índice de refracción, y el coeficiente de extinción fueron calculados.

Abstract. The structural, electronic, optical, and thermodynamic properties of $V_xAl_{1-x}N$ alloys were computed using first-principles calculations. The effects of exchange and correlation have been considered by means of the generalized gradient approximation (GGA) with the Perdew–Burke–Ernzerhof parametrization. Given that the binary precursor compounds VN and AlN crystallize in rock-salt and wurtzite, respectively, we carried out calculations for the ternary alloys in these two phases. The effect of V composition x (0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) on structural parameters, band-gap energies, mixing enthalpies, phase diagrams, density of states and band structure was studied. The effect of atomic composition on lattice constant, bulk modulus, and band-gap energy shows nonlinear dependence on concentration x . Deviations of the lattice constant from Vegard’s law, and deviations of the bulk modulus and gap-energy from linear concentration dependence were found. The physical origin of the band-gap bowing in wurtzite $V_xAl_{1-x}N$ compounds was investigated. To study the thermodynamic stability of $V_xAl_{1-x}N$, a regular-solution model was used. The real dielectric function, imaginary dielectric function, refractive index, and extinction coefficient were calculated.

Estudio estructural de las aleaciones de almacenamiento de hidrógeno basadas en TiCr usando el método de Rietveld

Structural study of hydrogen-storing alloys based on TiCr using the Rietveld method

A Martínez¹, D Bellon¹ and L Reina¹

¹ Universidad de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: alejandrom@udes.edu.co

Resumen. El almacenamiento de hidrógeno es uno de los pasos importantes en la implementación de la economía del hidrógeno, hidruros metálicos serán una forma prometedora para lograr este objetivo. En este trabajo se muestra el uso del análisis de Rietveld para caracterizar estructuralmente aleaciones a base de Ti que almacenan hidrógeno. Las aleaciones de $\text{TiCr}_{1.1}\text{V}_{0.9}$, $\text{TiCr}_{1.1}\text{V}_{0.45}\text{Nb}_{0.45}$, $\text{TiCr}_{1.1}\text{V}_{0.2}\text{Nb}_{0.8}$, $\text{TiCr}_{1.1}\text{Nb}_{0.8}$ fueron sintetizadas en un horno de arco bajo atmósfera de Ar y el análisis de las fases presentes fue desarrollado por XRD para mayor refinamiento de los dos parámetros de red y el porcentaje de las fases. Los resultados de cómo una estructura bcc en su mayoría combinada con un pequeño porcentaje de las fases de Laves, conduce a propiedades importantes en esta área. El análisis de Rietveld fue realizado por el programa Fullprof, este programa nos permite obtener los diferentes parámetros estructurales.

Abstract. Hydrogen storage is one of the important steps in the implementation of the hydrogen economy, metal hydrides being a promising way to achieve this goal. In this work the use of the Rietveld analysis is shown to structurally characterize Ti-based alloys that store hydrogen. The $\text{TiCr}_{1.1}\text{V}_{0.9}$, $\text{TiCr}_{1.1}\text{V}_{0.45}\text{Nb}_{0.45}$, $\text{TiCr}_{1.1}\text{V}_{0.2}\text{Nb}_{0.8}$, $\text{TiCr}_{1.1}\text{Nb}_{0.9}$ alloys were synthesized in an arc furnace under Ar atmosphere and analysis of the phases present were developed by XRD for further refinement of both parameters lattice and the percentage of the phases. The results how a bcc structure mostly combined with a small percentage of Laves phases, this leads to important properties in this area. The Rietveld analysis was performance by Fullprof program, this program let us obtain the different structural parameters.

Estudio ab-initio de las propiedades electrónicas y magnéticas de ZnO codopado con (Ga, Co)

Ab-initio study on electronic and magnetic properties of (Ga, Co) co-doped ZnO

A González-García¹, V Mendoza-Estrada¹, W López-Pérez¹, C Pinilla-Castellanos¹ and R González-Hernández¹

¹ Universidad del Norte, Barranquilla, Colombia

E-mail: alvarogonzalez@uninorte.edu.co

Resumen. En este estudio se han utilizado cálculos de primeros principios basados en la teoría del funcional de densidad dentro de la aproximación GGA para estudiar las propiedades electrónicas y magnéticas del sistema ZnO codopado con (Ga, Co). Se estudia el efecto que tiene la variación de la distancia entre las impurezas dopantes sobre el ferromagnetismo en el estado base del sistema $\text{Co}_{0.056}\text{Zn}_{0.944}\text{O}$. Los resultados muestran que para la configuración más cercana entre los átomos de Co, el estado base del sistema es ferromagnético, con una magnetización total de $3.00\mu_{\text{B}}$ por átomo de Co. Mientras que para la configuración más lejana, el estado base del sistema es antiferromagnético. Se encontró además que el nuevo sistema que resulta de la sustitución de iones de Zn^{2+} por iones de Ga^{3+} en el sistema $\text{Co}_{0.056}\text{Zn}_{0.944}\text{O}$ es más energéticamente estable. Por otro lado, el estudio revela que el dopaje de $\text{Co}_{0.056}\text{Zn}_{0.944}\text{O}$ con Ga redujo el ancho de la brecha de energía inicial en el sistema $\text{Co}_{0.056}\text{Zn}_{0.944}\text{O}$ debido a las interacciones de intercambio sp-d, lo cual está de acuerdo con los resultados experimentales. Los resultados muestran además que el sistema $\text{Ga}_{0.029}\text{Co}_{0.056}\text{Zn}_{0.915}\text{O}$ sigue siendo ferromagnético, con una magnetización total de $3.00\mu_{\text{B}}$ por átomo de Co. Finalmente, este estudio muestra que el estado base ferromagnético para ZnO codopado con (Ga, Co) desaparece cuando aumenta la concentración de Ga.

Abstract. Using first-principles calculations based on density functional theory within GGA formalism, we have studied the electronic structure and magnetic properties in (Ga, Co) co-doped ZnO system. The effect of impurity distances on ferromagnetic and antiferromagnetic ground state in $\text{Co}_{0.056}\text{Zn}_{0.944}\text{O}$ has been studied. For the closest Co-Co distance, a ferromagnetic ground state with total magnetic moment of $3.00\mu_{\text{B}}$ per Co atom has been found. Conversely, for the farthest Co-Co distance an antiferromagnetic ground state was found for $\text{Co}_{0.056}\text{Zn}_{0.944}\text{O}$. When Zn^{2+} ions are replaced by Ga^{3+} ions in $\text{Co}_{0.056}\text{Zn}_{0.944}\text{O}$, the new (Ga, Co) co-doped ZnO system is more energetically stable. Moreover, it has been found that Ga-doping reduces the $\text{Co}_{0.056}\text{Zn}_{0.944}\text{O}$ band gap due to the sp-d exchange interactions, which is in good agreement with the experimental data. Results also show that $\text{Ga}_{0.029}\text{Co}_{0.056}\text{Zn}_{0.915}\text{O}$ is still ferromagnetic with a total magnetic moment of $3.00\mu_{\text{B}}$ per Co atom. It was also found that the ferromagnetic ground state in (Ga, Co) co-doped ZnO vanishes as Ga concentration increase.

Estudio de primeros principios sobre las energías de formación de $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$

First-principles study on the formation energies of $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$

N Y Martínez Velásquez^{1,2} and J A Rodríguez Martínez¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

² Universidad de los Llanos, Villavicencio, Colombia

E-mail: nmartinez@unillanos.edu.co

Resumen. La estructura electrónica y la energía de formación del compuesto $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$ ha sido estudiada mediante métodos de primeros principios basados en la teoría del funcional de la densidad-DFT (Density Functional Theory). Se calcula la energía de formación del compuesto, así como de las vacancias y sustituciones. Las ecuaciones de Kohn-Sham se resuelven empleando el método de ondas planas y la aproximación de pseudopotenciales atómicos ultra suaves. Para la energía de intercambio y correlación se emplea la aproximación de gradiente generalizado, dentro de la parametrización de Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) tal como está implementada en el código computacional quantum-espresso, encontrándose que la configuración más favorable es la red GaAs haciendo una sustitución de un átomo de Ga por uno de Cr en las redes analizadas.

Abstract. The electronic structure and formation energy of the $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$ compound has been studied by principles of methods based on the Density Functional Theory. The formation energy of the compound is calculated, as well as the vacancies and substitutions. The equations of Kohn-Sham are solved employing the plane wave method and the ultra-soft atomic pseudopotentials approximation. The generalized gradient approximation was employed for the exchange and correlation energy in the Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) parametrization as it is implemented in the computational Quantum-Espresso code. It was found that the most favorable configuration is the GaAs lattice by doing the substitution of one Ga atom by one Cr in the analyzed lattices.

Investigación de las propiedades estructurales y electrónicas de las intercapas de VN/AlN/VN y AlN/VN/AlN basadas en calculos DFT

Research of structural and electronic properties of VN/AlN/VN and AlN/VN/AlN interlayers base on DFT calculation

J H Díaz Forero¹, M J Espitia Rico¹ and J A Rodríguez Martínez²

¹ Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Santafé de Bogotá, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

E-mail: jhdiazf1@gmail.com

Resumen. En este trabajo por medio de calculos de la teoría funcional de la densidad (DFT), investigamos las propiedades estructurales, electrónicas y magnéticas de las intercapas de AlN/VN/AlN y VN/AlN/VN. Los cálculos se llevaron a cabo mediante un método basado en pseudopotenciales, tal como es implementado en el código Quantum Espresso. En la descripción de la interacción electrón-electrón se utilizó la aproximación gradiente generalizado (GGA). El cálculo total de la energía revela que la intercapa de VN/AlN/VN es energéticamente más favorable que la de AlN/VN/AlN. Análisis de los estados de densidad demuestran que las intercapas tienen un comportamiento metálico que proviene esencialmente de los estados de hibridación y polarización V-d y N-p que cruzan el nivel de Fermi. Las intercapas tienen propiedades magnéticas con un momento magnético de $4\mu_B$ /celda. Debido a estas propiedades la intercapa puede ser potencialmente usada en el campo de la espintrónica.

Abstract. In this work by means of the Density Functional Theory (DFT) calculations, we investigate the structural, electronic and magnetic properties of the AlN/VN/AlN and VN/AlN/VN interlayers. The calculations were carried out by a method based on pseudopotentials, as implemented in the Quantum-Espresso code. For the description of the electron-electron interaction Generalized Gradient Approximation (GGA) was used. The total energy calculation reveal that the VN/AlN/VN interlayer is energetically most favourable that the AlN/VN/AlN. Analysis of the density of states show that the interlayers have metallic behaviour that comes essentially from the hybridization and polarization states V-d and N-p cross the Fermi level. The interlayers have magnetic properties with a magnetic moment of $4\mu_B$ /cell. Due these properties the interlayer can be potentially used in the field of spintronic.

Fase relativa y propiedades físicas de las multicapas de CrN/AlN: estudio DFT

Phase relative and physical properties of CrN/AlN multilayer: DFT study

E Cudris¹, J H Díaz F¹ and M J Espitia Rico¹

¹ Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Santafé de Bogotá Colombia

E-mail: ecudronobel@gmail.com

Resumen. Usando el método de primeros principios en el cálculo de la energía total en el marco de la teoría funcional de la densidad, se ha estudiado la estabilidad relativa y las propiedades estructurales y electrónicas de las multicapas de CrN/AlN en las estructuras de cloruro de sodio (NaCl), cloruro de cesio (CsCl), arseniuro de níquel (NiAs), zinc-blende y wurtzita. Los cálculos fueron ejecutados utilizando el método basado en pseudopotencial, empleado exactamente como es implementado en el código Quantum-Espresso. A partir de la reducción de la energía total, se encontró que la energía global mínima del CrN/AlN es obtenida en la estructura de wurtzite. Adicionalmente, a alta presión, nuestros cálculos muestran la posibilidad de transición de fase de la estructura wurtzite a la de NaCl. Los análisis de los estados de densidad en la fase wurtzite revelan que la multicapa tiene un comportamiento medio-metálico con un momento magnético de $3,0\mu_B/\text{Cr-átomo}$. Estas propiedades vienen esencialmente de los estados de polarización Cr-d y N-p que cruzan del nivel de Fermi. Debido a estas propiedades la intercapa puede ser potencialmente usada en el campo de la espintrónica o inyectores de espín.

Abstract. Using first principles total-energy calculations in the frame of density functional theory, we have studied the relative stability, structural and electronics properties of CrN/AlN multilayer in the sodium chloride (NaCl), cesium chloride (CsCl), nickel arsenide (NiAs), zinc-blende and wurtzite structures. The calculations were executed using the method based on pseudopotential, employed exactly as implemented in Quantum-Espresso code. From total energy minimization we found that the global energy minimum of CrN/AlN is obtained for wurtzite structure. Additionally, at high pressure, our calculations show the possibility of phase transition from the wurtzite to NaCl structure. For wurtzite phase the density states analyses reveal that the multilayer has a half-metallic behavior with a magnetic moment of $3.0\mu_B/\text{Cr-atom}$. These properties come essentially from polarization of states Cr-d and N-p crossing of the Fermi level. Due these properties the interlayer can be potentially used in the field of spintronics or spin injectors.

Mapeo confocal Raman de óxido formado térmicamente in Ti6Al4V ELI

Confocal raman mapping in Ti6Al4V ELI oxide formed thermally

B Zuluaga Díaz¹, H A Estupiñan¹ and P Abdullah Sundaram²

¹ Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

² Universidad de Puerto Rico, Recinto Universitario de Mayagüez, Mayagüez, Puerto Rico

E-mail: haestupinand@unal.edu.co

Resumen. Discos de Ti6Al4V ELI de 13mm de diámetro y 2mm de espesor fueron desengrasados en acetona y pulidos con papel abrasivo de 240, 320, 400, 600 y 1200. Luego, estos fueron limpiados con jabón neutro, se enjuaga con agua y llevado a un baño de ultrasonido con etanol (99%). En orden de caracterizar la oxidación térmica en una película de óxido que fue crecida en las muestras usando tratamientos de alta temperatura. Las muestras fueron divididas en dos grupos, las primeras fueron tratadas en un horno eléctrico usando diferentes temperaturas durante una hora, después enfriando lentamente a temperatura ambiente. El segundo grupo fue esterilizado a 121°C y 15psi en un autoclave durante una hora. Se preparó otro conjunto de muestras bajo las mismas condiciones de oxidación térmica y esterilización pero estas fueron inmersas por 7 días en solución SBF para posteriores análisis de interacción entre la película de óxido y la fase mineral adherida. Los óxidos fueron analizados por espectroscopia confocal Raman obteniendo el espectro y la información de mapeo químico para cuatro locaciones en los discos ($r=0$, $r=1/4$, $r=1/2$ and $r=3/4$). Además, se realizó un análisis químico y morfológico por SEM-EDX en cada muestra. Los resultados Raman muestran la presencia de óxidos de anatasa y rutilo en cada una de los cuatro sitios de cada muestra y también la formación de óxido de vanadio entre $r=1/2$ and $r=3/4$. También este tipo de óxido fue presentado en las muestras sujetas a inmersión en SBF en los mismos sitios. La presencia de este óxido, el cual proviene del vanadio como elemento aleante, fue reportada en otras investigaciones y es relacionado con alteraciones en la adhesión celular debido a su alta toxicidad.

Abstract. Ti6Al4V ELI discs of 13mm diameter and 2mm of thickness were degreased with acetone and polished with abrasive paper 240, 320, 400, 600 and 1200. Then, they were cleaned with neutral soap, rinsed with water and carried in ultrasonic bath with ethanol (99%). In order to characterize the thermal oxidation an oxide film was grown in the samples using high temperature treatments. Samples were divided in two groups, the first one was treated in an electric furnace using different temperatures during one hour, then cooling slowly to room temperature. The second one was sterilized at 121°C and 15psi in an autoclave during an hour. Other set of specimens were prepared under the same conditions of thermal oxidation and sterilization but these were immersed for 7 days in SBF solution for further analysis of interaction between the oxide film and the adhered mineral phase. The oxide was analyzed by confocal Raman spectroscopy obtaining the spectra and chemical mapping information for four locations on the discs ($r=0$, $r=1/4$, $r=1/2$ and $r=3/4$). Furthermore, morphological and chemical analysis by SEM-EDX was performed on each sample. Raman results showed the presence of anatase and rutile oxides in each one of the four sites for each specimen and also the formation of vanadium oxide between $r=1/2$ and $r=3/4$. Also this type of oxide was presented in the samples subjected to immersion in SBF at the same sites. The presence of this oxide, which comes from vanadium as an alloying element, had been reported in other research and it has been related with alterations on cell adhesion due to its high toxicity.

Caracterización de escamas ventrales de pieles de serpientes para la fabricación de superficies determinísticas bio-inspiradas para propósitos tribológicos

Topographic characterization of snake skin ventral scales for fabrication of bio-inspired deterministic surfaces for tribological purposes

P Cuervo¹, D A López¹, J P Cano¹, J C Sánchez¹, S Rudas^{1,2}, H A Estupiñán¹, H A Abdel-Aal³ and A Toro¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

² Institución Universitaria Pascual Bravo, Medellín, Colombia

³ Drexel University, Philadelphia, USA

E-mail: jcsanhego@unal.edu.co

Resumen. La biomimética estudia sistemas, procesos y elementos naturales con el fin de imitarlos o inspirarse en su comportamiento para brindar soluciones específicas a problemas en ingeniería. Un tipo de solución que se ha desarrollado consiste en la fabricación de texturas superficiales con características geométricas diseñadas para cumplir funciones tribológicas específicas. En ese sentido, el desempeño de la piel de las serpientes en contacto deslizante con diferentes tipos de superficies viene siendo un tema importante de estudio para el desarrollo de sistemas donde el consumo de fricción y la disminución de las pérdidas por desgaste son cruciales, dada la naturaleza determinística de las sub-estructuras encontradas en las escamas ventrales de dichos animales. La reducción del desgaste y el control de la fricción son tareas fundamentales de la ingeniería de superficies. En algunos casos el uso de texturas superficiales determinísticas contribuye a generar mejores condiciones de predictibilidad en los sistemas, ya que el control de los parámetros de rugosidad tiene un efecto dominante sobre los coeficientes de fricción y los regímenes de lubricación. En el presente trabajo se estudiaron, por medio de técnicas no destructivas como SEM, OM y AFM, características topográficas propias de las escamas ventrales de serpientes de las especies Boa Red Tail, Vipera Ammodytes, Pseudechis Australis y Python Regius, y se relacionaron con aspectos mecánicos asociados a su locomoción tales como relación peso/longitud, áreas aparentes y reales de contacto, potencia consumida en fricción, entre otros. Luego de esto, se texturizaron superficies metálicas de Ti4Al6V usando un método litográfico y de enmascarado anódico. Se obtuvieron patrones de protuberancias de sección elíptica con relaciones de aspecto de 2.5 y 4.0 definidas a partir de la caracterización hecha y los parámetros encontrados de las escamas ventrales de la piel de serpientes. Estas superficies fueron igualmente caracterizadas por medio de técnicas como SEM, Raman, EDS y reconstruidas por medio de un software de superficies. La caracterización reveló la presencia de estructuras ordenadas en diferentes escalas desde la distribución de las escamas hasta las fibrillas que constituyen la topografía fina de cada escama, con parámetros cuantitativos característicos en términos de relaciones de aspecto de fibrillas y escamas, separación entre hileras de fibrillas, entre otros. Con respecto a las superficies texturizadas, se dio cuenta que con el método usado de litografía por máscara, es posible contruir protusiones sobre superficies de Ti4Al6V con arreglos determinísticos y estructuras con alturas, separación entre ellas y con parámetros geométricos totalmente controlados.

Abstract. Biomimetics studies systems, processes and natural elements in order to mimitize (or be inspired by) their behavior to provide specific solutions to engineering problems. One type of solution

that has been developed is the production of surface textures with geometric features designed for specific tribological functions. In that sense, the performance of the snake skin in sliding contact against different types of surfaces is still a major topic of study for developing systems where reduced energy consumption and low friction and wear are crucial, due the deterministic nature of the sub-structures found in the ventral scales of the snakes. Thus, the use of surface textures with deterministic patterns enhances the system's predictability given the considerable influence that the roughness parameters have on friction behavior and lubrication regimes. A source of inspiration for defining deterministic patterns is the snake-skin. In this work a number of non-destructive techniques such as SEM, OM and AFM were used to finely characterize the topography of the ventral scales of snake species Boa Red Tail, Vipera Ammodytes, Pseudechis Australis and Phyton Regius, and the results were related to mechanical aspects such as weight/length ratio, real and apparent contact areas, power consumed in friction, among others. From this characterization, the surface of Ti4Al6V samples was texturized through mask lithography method and patterns with elliptic features with aspect ratio of 2.5 and 4.0 were obtained inspired in the parameters found in the ventral scales. The surface samples were too characterized with techniques like SEM, Raman, EDS and reconstructed with a surface software. Some results revealed the presence of ordered structures in different scales, starting with the distribution of the ventral scales along the body and including the fibril's fine topographic details within a single scale. Quantitative parameters were defined to account for natural features of the surfaces such as aspect ratios, separations between rows of fibrils, among others. Respect the surfaces texturized, it realizes that with the method used, it's possible build protrusion over surface of Ti4Al6V with a deterministic arrange and structures with height, separation between features and geometrical parameters controlled.

Ocupación electrónica del sistema medio-metálico $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ con la estimación de la interacción en sitio

Electronic occupation of the half metallic system $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ with the estimation of the on-site interaction

A M Reyes^{1,2}, Y Arredondo¹ and O Navarro²

¹ Unidad Morelia, Universidad Nacional Autónoma de México, Morelia, Michoacán, México

² Universidad Michoacana de San Nicolás de Hidalgo, Morelia, Michoacán, México

E-mail: reyesabdul@iim.unam.mx

Resumen. Las investigaciones sobre el sistema medio-metálico $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ pertenecen a un campo dinámico de investigación debido a sus aplicaciones potenciales en espintrónica y el hecho de que sus propiedades electrónicas y magnéticas no se entienden completamente. Las interacciones locales en dicho sistema, juegan también un papel determinante en sus propiedades. En este trabajo estimamos el parámetro Hubbard U e investigamos la ocupación en sitio como una función de U , analizando el comportamiento de los orbitales d en sitios de Fe y Mo por cálculos de primeros principios utilizando la respuesta lineal en el método LDA+ U con funcionales GGA.

Abstract. Investigations on the half metallic system $\text{Sr}_2\text{FeMoO}_6$ belong to a dynamic field of research due to its potential applications on spintronics and the fact that its electronic and magnetic properties are not fully understood. Local interactions in such system play as well a determining role on its properties. In this work we estimate the Hubbard U parameter and investigate the on-site occupation as a function of U , analyzing the behavior of d orbitals in Fe and Mo sites by first principle calculations using the linear response in the LDA+ U method with GGA functionals.

Caracterización de un recubrimiento multifuncional nanoestructurado en Ti6Al4V ELI obtenido mediante oxidación por plasma electrolítico

Characterization of a multifunctional nanostructured coating on Ti6Al4V ELI obtained by plasma electrolytic oxidation

S Leal Marin¹ and H A Estupiñán Duran¹

¹ Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

E-mail: samlealma@unal.edu.co

Resumen. La aleación Ti6Al4V ELI es uno de los materiales más empleados para dispositivos de osteosíntesis debido a sus propiedades de biocompatibilidad y osteointegración con el tejido óseo. Sin embargo, no presenta las condiciones superficiales ideales de resistencia al desgaste y favorecimiento de la osteogénesis. El objetivo de este trabajo fue la evaluación de un recubrimiento multifuncional obtenido mediante oxidación por plasma electrolítico (PEO). Se emplearon discos de Ti6Al4V ASTM F136 de 13mm de diámetro y 2mm de espesor, los cuales fueron pulidos con lija de SiC 240, 320, 400, 600 y 1200. Estos fueron limpiados en ultrasonido con alcohol isopropílico y luego enjuagados con agua destilada. Previo al proceso de obtención del recubrimiento, se realizó un decapado con una solución de 3%HF y 20% HNO₃. El recubrimiento se creció en dos etapas; la primera, por un proceso de anodizado con ácido ortofosfórico 0.5M con el fin de crecer los óxidos de titanio preferenciales y la segunda etapa, mediante una oxidación por plasma electrolítico con una solución enriquecida en iones PO₄²⁻, Ca⁺², Si⁺² y Ag⁺². Se empleó una fuente de corriente directa con conexión a la muestra y a un cátodo de acero inoxidable, así como una densidad de corriente constante de 8mA/cm² y 70mA/cm² para la primera y segunda etapa respectivamente. Posteriormente, se realizó un tratamiento térmico a 600°C durante 1 hora. La caracterización morfológica se realizó por SEM y la composicional por EDS, DRX y microscopia Raman confocal, con el fin de identificar fases de óxido y la capa enriquecida de iones en el recubrimiento. La presencia de plata como agente antibacterial y la relación Ca/P promotora de osteogénesis fue establecida. Los resultados morfológicos mostraron una estructura rugosa redondeada, con nanoestructuras acompañadas de poros interconectados en promedio de 1µm. Los mapeos realizados por EDS mostraron una distribución uniforme de Ag en la superficie, cuyo propósito es generar actividad antibacterial. El espectro de DRX y los espectros de Raman confocal mostraron la presencia mayoritaria de anatasa en el recubrimiento y una menor cantidad de rutilo, el cual es un compuesto promotor de adhesión y crecimiento celular. La relación Ca/P ~0.8 da un indicio de que debe aumentarse la concentración de iones en solución para que sea más similar a la hidroxiapatita y coincidir con índices favorecedores de osteogénesis. La composición y morfología presentada en este recubrimiento obtenido por PEO lo hace un candidato para mejorar las propiedades superficiales de bioactividad del Ti6Al4V ASTM F136, puesto que se favorece por esta técnica la incorporación de iones en solución hacia el recubrimiento, formando compuestos funcionales promotores de osteogénesis y actividad antibacterial.

Abstract. Ti6Al4V ELI alloy is one of the most commonly used materials for osteosynthesis devices due to its biocompatibility and osseointegration with bone tissue. However, it has no ideal surface conditions related with wear resistance and osteogenesis stimulation. The aim of this study was the evaluation of a multifunctional coating obtained by plasma electrolytic oxidation (PEO). Ti6Al4V ASTM F136 disks of 13mm diameter and 2mm thick were used, they were polished with sandpaper of

SiC 240, 320, 400, 600 and 1200, cleaned in ultrasound with isopropyl alcohol and then rinsed with distilled water. Prior to the coating process, pickling was performed with a solution of 3% HF and 20% HNO₃. The coating was grown in two stages; the first, by an anodizing process with 0.5M orthophosphoric acid to grow preferential titanium oxides and the second stage, by electrolytic plasma oxidation in an enriched PO₄²⁻, Ca⁺², Si⁺² and Ag⁺² ion solution. A direct current power was employed, it was connected to the sample and a stainless steel as cathode using constant current density of 8mA/cm² and 70mA/cm² for the first and second stage respectively. Following a heat treatment was performed at 600°C during 1 hour. Morphological characterization was carried out by SEM and compositional by EDS, confocal Raman microscopy and DRX in order to identify oxide phases and ion enriched in the coating layer. The presence of silver as an antibacterial agent and the Ca/P ratio for osteogenesis stimulation was established. Morphological results showed a rounded rough structure with nanostructures accompanied by interconnected pores of approximately 1µm. Mappings made by EDS showed a uniform distribution of Ag on the surface responsible of generate antibacterial activity. The XRD spectrum and confocal Raman spectra showed a predominant presence in the coating of anatase and fewer rutile which is a compound promoter of adhesion and cell growth. The Ca/P ratio ~0.8 gives an indication that will be necessary to increase the ion concentration in solution to make it more similar to the hydroxyapatite ratio and promote osteogenesis. The composition and morphology presented for this coating obtained by PEO makes it a candidate to improve the surface bioactivity in Ti6Al4V ASTM F136, because this technique facilitates ion incorporation in the electrolytic solution of the coating. Promoting the formation of functional compounds and antibacterial activity.

Medición del incremento de la temperatura celular de celda abierta de aleación de Zn-22Al-2Cu

Temperature increment measurement of open-celled cellular Zn-22Al-2Cu alloy

R Guzmán López¹ and A Santos Jaimes¹

¹ Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

E-mail: rolando.guzman@upb.edu.co

Resumen. En este trabajo se realizó la caracterización mecánica de espumas metálicas de aleación ZINALCO (Zn-22Al-2Cu), obtenidas con la técnica de réplica de estructura mediante el acomodamiento de partículas de Na-Cl dentro de un molde de 1.5cm*1.5cm*3.5cm. La caracterización mecánica se realizó mediante ensayos de compresión cuasiestática, y de los datos obtenidos en el ensayo se determinó de forma teórica, la capacidad de absorción de energía para cada espuma y el módulo de Young. Se utilizó la técnica termografía (TIR) para la medida cualitativa y cuantitativa de la radiación que incide sobre el sistema de imagen IR, producida tras el proceso de deformación, durante el ensayo de compresión cuasiestática. La técnica TIR presenta varias ventajas frente al uso de termopares; es una técnica no invasiva, permite la medida simultánea de todos los puntos de la superficie de la probeta, ofrece rápidos tiempos de respuesta y no necesita estabilización térmica del detector; la problemática de la técnica TIR es la calibración radiométricamente teniendo en cuenta las leyes de radiación, emisividad real de la superficie, y sistema sensor.

Abstract. In this work was performed the mechanical characterization of metal foams of ZINALCO alloy (Zn-22AL-2Cu), obtained with the technique of structure replica by the accommodation of Na-Cl particles within a mold 1.5cm*1.5cm*3.5cm. The mechanical characterization was performed using assays quasiestática compression, and with of data obtained in the test is determined so theoretic, the energy absorption capacity for each foam and the Young's modulus. thermography technique (IRR) was used for the qualitative and quantitative measure of the radiation that incident on the IR imaging system, produced after the deformation process during the quasiestática compression test. The TIR technique has several advantages front the use of thermocouples; It is a non-invasive technique allow the simultaneous measurement of all points of the surface of the sample, provides fast times of response and does not need thermal stabilization of the detector; the problem of TIR technique is radiometrically calibration considering the laws of radiation, actual emissivity of the surface, and sensor systemis radiometrically considering the laws of radiation, actual emissivity of the surface, and sensor system.

Conjugado de L-cisteína para nanopartículas de plata (AgNPs): Estudio de interacción

Conjugate of L-cysteine to silver nanoparticles (AgNPs): interaction study

Y A Prada¹, J Gómez¹, R Cabanzo¹ and E Mejía³

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: yuly.prada@correo.uis.edu.co

Resumen. Las nanopartículas metálicas se han utilizado durante siglos, pero muchos autores dicen que en este siglo hemos sofisticado la bondad del equipo para explorar más profundamente. Actualmente, se están empleando moderadamente AgNPs en aplicaciones biomédicas por su alto efecto antimicrobiano. Sabemos que muchas de estas proteínas se componen de aminoácidos tales como cisteína y metionina, que tienen el grupo tiol como cadena lateral altamente reactiva. Se sabe que la cisteína desempeña un papel importante en los procesos de transducción de señal de las proteínas transmembrana, ya que pueden ser unidas por puentes disulfuro con otras proteínas para marcar las etapas iniciales y finales del ciclo celular. En este trabajo, obtenemos AgNP mediante la reducción de nitrato de plata con sodio y con borohidruro de sodio. El tamaño medio de las partículas fue de $16.19\text{nm}\pm 0.13$ (proporción) y la forma esférica fue confirmada mediante TEM. La medida del potencial Zeta fue de -36.4mV . El AgNP era conjugado de L-cisteína por absorción del tiol, amino y carboxilo en el medio de la superficie de la nanopartícula en función del valor de pH. Otros parámetros tales como la concentración de L-Cys, la relación molar, el pH y el tiempo de proceso los cuales influyeron en el proceso de funcionalización fueron estudiados. Los resultados fueron verificados por dispersión Raman de superficie aumentada (SERS).

Abstract. Metal nanoparticles have been used for centuries, but many authors say that in this century we have sophisticated to explore more deeply their kindness equipment. Currently, they are employed AgNPs moderately in biomedical applications for its high antimicrobial effect. We know that many of these proteins are made up of amino acids such as cysteine and methionine which have thiol group as a highly reactive side chain. It is known that cysteine plays an important role in signal transduction processes of transmembrane proteins because they can be joined by disulfide bridges with other proteins to mark the beginning and ending stages of the cell cycle. This work, we get AgNP by reducing of silver nitrate with sodium and with borohydride sodium. The average size of particles was $16.19\text{nm}\pm 0.13$ (ratio) and the spherical shape was confirmed by TEM. The Zeta potential measure was -36.4mV . The AgNP were conjugate to L-cysteine by absorption of the thiol, amino and carboxyl on the surface of the nanoparticle in function of pH value in the medium. Other parameters that influenced the functionalization process were studied, such as L-Cys concentration, molar ratio, pH and time of process. The results were verified by Surface-Enhanced Raman Scattering (SERS).

Propiedades, magnéticas, estructurales electrónicas y constantes elásticas de la perovskita compleja $\text{Ba}_2\text{TiMnO}_6$ por medio de DFT

Magnetic, structural, elastic constants and electronic properties of the $\text{Ba}_2\text{TiMnO}_6$ complex perovskite by means of DFT

C E Deluque Toro¹, R Bertel Palencia¹, D Landínez-Téllez² and J Roa-Rojas²

¹ Universidad de la Guajira, Riohacha, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

E-mail: deluquetoro@gmail.com

Resumen. Materiales de perovskita que incluyen elementos magnéticos tienen relevancia debido a las perspectivas tecnológicas en la industria de la espintrónica. En este trabajo, se investigan las propiedades magnéticas, estructurales, electrónicas y constantes elásticas de la doble perovskita $\text{Ba}_2\text{TiMnO}_6$. Los cálculos se llevan a cabo mediante el método de ondas planas aumentadas y linealizadas con potencial completo (FP-LAPW) en el marco de la teoría funcional de la densidad (DFT) con efectos de intercambio y correlación en las aproximaciones de gradiente generalizado (GGA) y densidad local (LDA), incluyendo la polarización de espín. A partir de la minimización de la energía como una función del volumen usando la ecuación de estado de Murnaghan se obtuvieron las propiedades cohesivas y el parámetro de equilibrio de red de este compuesto. El estudio de la estructura electrónica se basó en el análisis de la densidad de estados electrónica (DOS), y la estructura de bandas, lo que demuestra que este compuesto evidencia un momento magnético efectivo de $3.0\mu_B$.

Abstract. Perovskite-like materials which include magnetic elements have relevance due to the technological perspectives in the spintronics industry. In this work, the magnetic, structural, elastic constants and electronic properties of the $\text{Ba}_2\text{TiMnO}_6$ double perovskite are investigated. Calculations are carried out through the Full-Potential Linear Augmented Plane Wave method (FP-LAPW) within the framework of the Density Functional Theory (DFT) with exchange and correlation effects in the Generalized Gradient (GGA) and Local Density (LDA) Approximations, including spin polarization. From the minimization of energy as a function of volume using the Murnaghan state equation the equilibrium lattice parameter and cohesive properties of this compound were obtained. The study of the electronic structure was based in the analysis of the electronic Density Of States (DOS), and the Band structure, showing that this compound evidences an effective magnetic moment of $3.0\mu_B$.

Estudio de las propiedades electrónicas de la estructura y característica magnética de la perovskite compleja A_2NiMoO_6 (A=Sr, Ba) por medio de calculos de primeros principios

Study of the electronic structure properties and magnetic feature of the A_2NiMoO_6 (A=Sr, Ba) complex perovskite by means of first-principles calculations

C E Deluque Toro¹, S Zambrano Rojas¹, D A Landínez Téllez² and J Roa-Rojas²

¹ Universidad de la Guajira, Riohacha, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

E-mail: deluquetoro@gmail.com

Resumen. Presentamos los cálculos de primeros principios de las propiedades elásticas, estructura electrónica y magnética realizados sobre la doble perovskita A_2NiMoO_6 (A=Sr, Ba). Los cálculos se llevarán a cabo mediante el método de ondas planas aumentadas y linealizadas con potencial completo (FP-LAPW) en el marco de la teoría funcional de la densidad (DFT) con efectos de intercambio y correlación en las aproximaciones de gradiente generalizado (GGA) y densidad local (LDA), incluyendo la polarización de espín. Los parámetros estructurales, las energías totales y las propiedades cohesivas de la perovskita son estudiados por medio de la minimización de los parámetros internos con la ecuación Murnagan. Los parámetros estructurales obtenidos a partir de la minimización de la energía, a través de la ecuación de estado sólido Murnaghan, están 99,5% de acuerdo con los datos de red esperado. Los resultados de la densidad de estados total y parcial revelan el carácter no conductor de este material con momento magnético efectivo de $2.0\mu_B$.

Abstract. We report first-principles calculations of the elastic properties, electronic structure and magnetic performed over the A_2NiMoO_6 (A=Sr, Ba) double perovskite. Calculations are carried out through the Full-Potential Linear Augmented Plane Wave method (FP-LAPW) within the framework of the Density Functional Theory (DFT) with exchange and correlation effects in the Generalized Gradient (GGA) and Local Density (LDA) approximations, including spin polarization. Structural parameters, total energies and cohesive properties of the perovskite are studied by means minimization of internal parameters with the Murnagan equation. The structural parameters obtained from the energy minimization, through the Murnaghan solid state equation, are 99.5% in agreement with the expected lattice data. Results of total and partial density of states reveal the non-conductor character of this material with effective magnetic moment of $2.0\mu_B$.

Caracterización de distribución de fases mediante Raman confocal y microscopia electrónica de barrido de un recubrimiento osteoconductor de HA-nZrO_{2-n}Ag (EN) obtenido por proyección térmica por plasma

Characterization of phases distribution by confocal Raman and scanning electron microscopy of an osteoconductive coating by HA-nZrO_{2-N}Ag (EN) obtained by thermal plasma spraying

R Gómez Batres¹, V M Orozco Carmona¹ and H A Estupiñan Duran²

¹ Centro de Investigación en Materiales Avanzados S. C., Chihuahua, México

² Universidad Nacional de Colombia, Medellín, Colombia

E-mail: roberto.gomez@cimav.edu.mx , haestupinand@unal.edu.co

Resumen. La demanda de materiales metálicos en la industria médica para la fabricación de prótesis de cadera ha tenido un incremento significativo en las últimas décadas. Sin embargo, estos presentan algunas desventajas debido a la diferencia de propiedades mecánicas entre el tejido óseo y el material, sumado a la fácil adherencia de microorganismos sobre la superficie durante la manipulación del implante, ambas pueden provocar un aflojamiento aséptico debido a la osteólisis periprotésica e infección bacteriana. Debido a esto se desarrolló y caracterizó un recubrimiento en base a una matriz de hidroxiapatita (HA), nanopartículas de circonia estabilizadas con itria (nZrO₂-YSZ 8%) y nanopartículas de plata obtenidas mediante un método verde de extracto de nopal (nAg-EN). El cual tiene como propósito prevenir el rechazo interviniendo en la interfase de tejido implante, favoreciendo la osteoconducción y previniendo la infección intra y post operatoria; además mejorando la baja adherencia con la que cuentan los recubrimientos utilizados para regeneración ósea. El recubrimiento fue desarrollado en base a polvos precursores con una relación (% P/P) de 89.1%HA-9.9%nZrO₂(YSZ)-1%nAg los cuales fueron mezclados hasta obtener una matriz homogénea mediante dos métodos; el primer método fue realizado por agitación mecánica durante una hora en un recipiente cilíndrico manteniendo una agitación a 55rev/min, el segundo fue homogenizado mediante molienda mecánica a 30 minutos en un molino XPEX de alta energía, posteriormente el recubrimiento fue depositado mediante proyección térmica por plasma (Praxair Thermal Plasma Spray SG100). Para observar la distribución de fases en los recubrimientos se usó la técnica de mapeo en microscopio confocal Raman (Horiba Labram Hr Evolution 532nm), la topografía y distribución de fases fue analizada mediante microscopia electrónica de barrido (Carl Ziesse Evo 10) con electrones secundarios y retrodispersados respectivamente. Además mediante un mapeo elemental y análisis de energía dispersa de rayos X (XEDS) se observó la distribución elemental así como una semicuantificación de estas sobre el recubrimiento. De acuerdo a los resultados el recubrimiento obtenido en base a la homogenización mediante molienda mecánica presenta una mejor distribución de fases que los recubrimientos homogenizados mediante el método de agitación mecánica.

Abstract. The demand of metallic materials for fabrication of prosthesis in the medical industry have had significant increases during the last decades. Nevertheless these have some disadvantages due to the difference in mechanical properties between the bone tissue and the material, coupled with the easy adhesion of microorganisms on the surface during handling of the implant, both can lead to aseptic

loosening due to periprosthetic osteolysis and bacterial infection. The aim of the study was developing and characterizing a coating based on a matrix of hydroxyapatite (HA), nanoparticles of zirconia stabilized with yttrium ($n\text{ZrO}_2\text{YSZ}$ 8%) and silver nanoparticles obtained by a green method of nopal extract (nAg-EN) it is intended to prevent rejection intervening in the tissue-implant interface, promoting osteoconduction and preventing intra and postoperative infection; further improving the low adhesion presented in coatings used for bone regeneration. The coating was developed based on precursor powders with a ratio (W/W%) of 89.1%HA-9.9% $n\text{ZrO}_2\text{(YSZ)}$ -1% $n\text{Ag}$ them were mixed until a homogeneous matrix by two methods; the first method was performed by mechanical agitation for one hour in a cylindrical vessel maintaining agitation at 55 rev / min, the second was homogenized by mechanical milling for 30 minutes in a XPEX high energy mill, subsequently the coating was deposited by thermal spraying plasma (Praxair Thermal Plasma Spray SG100). To observe the distribution of phases in the coatings mapping technique was used in confocal Raman microscopy (Horiba Labram Hr Evolution 532nm), topography and phase distribution was analyzed by scanning electron microscopy (Carl Zeisse Evo 10) with secondary and backscattered electrons respectively. In addition by means of an elemental mapping and analysis of energy dispersive X-ray (XEDS) the elemental distribution as well as a semi-quantification of these on the coating was observed. According to the results the coating obtained by mechanical milling homogenization has better phase distribution than the one homogenized by mechanical stirring method.

Las más estables monocapas de (111)-Pt (fcc) sobre grafeno: un estudio del método de primer principio GGA+U

The most stables mono-layers of (111)-Pt (fcc) on graphene: a first-principle GGA+U study

J Otálora Acevedo^{1,2}, J A Rodríguez Martínez¹, M G Moreno-Armenta³, E Vera² and N Takeuchi Tan³

¹ Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

² Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

³ Universidad Autónoma de México, Ciudad de México, México

E-mail: jose.otalora@uptc.edu.co , joseotalora03@gmail.com

Resumen. El creciente interés en la adsorción de átomos en el grafeno nos ha motivado estudiar la adsorción de Pt sobre el grafeno. Este sistema presenta una posible aplicación en los sistemas baratos para convertir CO en CO₂ por medio de una reacción catalítica. En este trabajo, no atacamos el problema catalítico; en lugar de ese estudio, partimos de la adsorción del Pt sobre el grafeno en la parte superior de C (punto T), en el puente, (Br), y en el centro del hexágono (H6). Hemos descubierto que el sitio más estable parece ser H6. Después de eso, investigamos las monocapas de Pt sobre el grafeno, cuando los átomos de Pt se ponen en T, Br y H6. Sin embargo, la entalpía de formación mostró que es inestable respecto al grafeno limpio debido a que el desajuste de la retícula es muy alto. Entonces, buscamos otras mono-capas con menor desajuste. Encontramos estructuras como $\sqrt{21} * \sqrt{21}$ -grafeno/4*4(111)Pt-fcc (fcc significa cúbica centrada en las caras) con desfase de 0,3% o $2\sqrt{3}*2\sqrt{3}$ -grafeno/3*3(111)Pt-fcc con desfase de -0,5%, o $2*2$ -grafeno/ $\sqrt{3}*\sqrt{3}$ (111)Pt-fcc con desfase del -05% que son prometedoras. En este trabajo presentamos la dependencia de la entalpía de formación de estas estructuras y se calcularon los parámetros estructurales de la relajación de todas ellas. Además, calculamos las propiedades electrónicas de estas estructuras y una comparación con las bandas de grafeno, pudimos determinar la mejor estructura, a estudiar en un futuro, de la reacción catalítica para convertir CO en CO₂ sobre la superficie de Pt/grafeno. Los cálculos fueron realizados en el marco de la teoría funcional de la densidad DFT tal como es implementada en el código quantum-espresso. Los potenciales de intercambio y correlación fueron calculados en la aproximación de GGA con la parametrización Perdew-Burke-Ernzerhof; además, un factor de correlación del U de Coulomb entre los electrones d-Pt fue incluido en los cálculos.

Abstract. The increasing interest in the adsorption of atoms on graphene has motivated to us to study the adsorption of Pt on graphene. This system presents a possible application on cheap systems to convert CO on CO₂ by means of catalytic reaction. In this work, we do not attack the catalytic problem; instead of that study, we start with the adsorption of the Pt on graphene on top of C (T point), on bridge, (Br), and at the center of the hexagon (H6). We have found that the most stable site seems to be H6. After that, we investigate the mono-layers of Pt on graphene, when the Pt atoms are put on T, Br and H6. However, the enthalpy of formation showed that are unstable respect to the clean graphene because the lattice mismatch is very high. Then, we search other mono-layers with lesser mismatch. We found structures as $\sqrt{21}*\sqrt{21}$ -graphene/4*4 (111)Pt-fcc (fcc is face-centered cubic) with mismatch of 0.3% or $2\sqrt{3}*2\sqrt{3}$ -graphene/3*3(111)Pt-fcc with mismach of -0.5%, or $2*2$ -graphene/ $\sqrt{3}*\sqrt{3}$ (111)Pt-fcc with mismatch of -05% are promising. In this work we present the dependence of the enthalpy of formation of these structures and we calculated all structural parameters of the relaxation of all them. Also, we calculated the electronic properties of these structures and a comparison with the

bands of the graphene, we can to determine the best structure, to studying in a future, of the catalytic reaction to convert CO in CO₂ on the surface of Pt/graphene. The calculations were performed in the framework of Density Functional Theory DFT as well is implemented in the Quantum-espresso code. Exchange and correlation potentials were calculated in the GGA approximation with the Perdew-Burke-Ernzerhof parametrization; additionally an U Coulomb correlation factor between the d-Pt electrons was included in the calculations.

Estudio de la teoría funcional de la densidad acerca de la adsorción de átomos de Li y Si sobre grafeno

Density functional theory study about adsorption of Li and Si atoms on graphene

J Otálora Acevedo^{1,2}, J A Rodríguez Martínez¹, M G Moreno-Armenta³, E Vera² and N Takeuchi Tan³

¹ Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

² Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

³ Universidad Autónoma de México, Ciudad de México, México

E-mail: jose.otalora@uptc.edu.co , joseotalora03@gmail.com

Resumen. Hoy en día, el grafeno es el material tecnológico más importante pero su potencial es mayor cuando se utiliza en combinación con otros materiales. Por ejemplo, las interfaces como GaN/grafeno, Si/grafeno, Li/grafeno y otros han sido estudiados y exhiben un gran potencial tecnológico. En particular, esta investigación está dedicada a grafeno/Li y grafeno/Si, que son estudiados usando el código de Quantum-Espresso, el cual se basa en la teoría funcional de la densidad (DFT). El principal objetivo es determinar la posición más estable para la adsorción por medio de cálculos de energías totales. Los sitios de adsorción considerados son en la parte superior del C (sitio T), en el hueco hexagonal (sitio H) y entre dos átomos de carbono adyacentes o no adyacentes (sitios puentes). Estas configuraciones son simuladas por medio de un modelo de placa que es hecha de una supercelda de grafeno bidimensional 3x3 y separación alrededor de 15Å es utilizado en las placas consecutivas. Los cálculos de la energía total en varios sitios de la adsorción del átomo de Li muestran que el punto más estable está en la posición del puente entre dos átomos adyacentes de C. En esta posición se encuentra un momento magnético de 0.16 μ_B /celda. Este momento magnético es producido por dos elementos no magnéticos y es debido a la hibridación entre los electrones de valencia de p-C y s-Li. En el caso de la adsorción de átomos de Si, los cálculos muestran que el puente entre los átomos adyacentes es la posición más estable, y la peor posición está en el punto H. Los grupos de puntos de la simetría son respectivamente C_{2v} y D_{3h} . El sitio H es un mal sitio de adsorción porque en el punto H hay seis átomos como primeros vecinos y el C y el Si tienen cuatro electrones de valencia. Este hecho no es favorable para conseguir un mínimo de energía y al mismo tiempo el número mínimo de enlaces colgantes. Las propiedades electrónicas como la densidad de estados (DOS) y las bandas electrónicas, se presentan para las configuraciones más estables en ambos casos de la adsorción de átomos de Si y Li. Las propiedades estructurales como las longitudes de enlace, la separación de la capa de grafeno y la energía de adsorción son presentadas.

Abstract. Nowadays, graphene is the most important technological material but its potential is enhanced when it is used in conjunction with other materials. For example, interfaces as GaN/graphene, Si/graphene, Li/graphene and others have been studied and exhibit a great technological potential. Particularly, this research is devoted to graphene/Li and graphene/Si, which are studied using Quantum-Espresso code, which is based on density functional theory (DFT). The main objective is to determine the most stable position for adsorption by means of total energy calculations. Adsorption sites considered are on top of C (T site), on hexagonal hollow (H site) and between two carbons adjacent or not adjacent atoms (bridge sites). These configurations are simulated by means of a slab model which is made from a 3x3 bidimensional graphene supercell and separation about 15Å is used in consecutive slabs. Calculations of total energy for several sites of adsorption of Li

atom show that the most stable point is on the bridge position between two adjacent atoms of C. For this position a magnetic moment of $0.16\mu_B/\text{cell}$ is found. This magnetic moment is produced by two non-magnetic elements and it is due to hybridization between the valence electrons of p-C and s-Li. In the case of Si-atoms adsorption, calculations show that the bridge between adjacent atoms is the most stable position, and the worst position is at the H point. The symmetry point groups respectively are C_{2v} and D_{3h} . The H site is a bad adsorption site because at H point there are six atoms as first neighbors and C and Si has four valence electrons. This fact is not favorable to get a minimal energy and simultaneously minimal number of dangling bonds. Electronic properties as Density Of States (DOS) and electronic bands, are presented for the most stable configurations for both adsorption cases of Si and Li atoms. Structural properties as bond lengths, separation from graphene layer and adsorption energy are presented.

Propiedades magnéticas y electrónicas por medio de calculos de primeros principios de nuevos materiales basados en la adsorción de V, Co y Ni sobre grafeno

Magnetic and electronic properties by means of first-principles calculations of new materials based on absorption of V, Co and Ni on graphene

J Otálora Acevedo^{1,2}, J A Rodríguez Martínez¹, M G Moreno-Armenta³, E Vera² and N Takeuchi Tan³

¹ Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

² Universidad Pedagógica y Tecnológica de Colombia, Tunja, Colombia

³ Universidad Autónoma de México, Ciudad de México, México

E-mail: jose.otalora@uptc.edu.co , joseotalora03@gmail.com

Resumen. Nuevos materiales con propiedades físico-químicas mejoradas se obtienen por medio de la adsorción de 3d-átomos de metales de transición (3d-TM) sobre el grafeno. El estudio de estos materiales se lleva a cabo usando la teoría funcional de la densidad moderna (DFT) por medio de la adsorción simétrica de átomos en la capa de grafeno 3x3. Este trabajo se concentra en la adsorción de V, Co y Ni como punto inicial para encontrar las principales características y el comportamiento físico-químico de estas estructuras. Los sitios de adsorción considerados son los puentes (Br), los puntos T y H que corresponden a los sitios en el punto medio entre dos átomos de carbono (primero y segundo vecinos), por encima del C, y en el centro del hexágono respectivamente. El caso específico de la adsorción Vanadio muestra que el punto más estable de todas las configuraciones realizadas es el Br y que la posición inestable se encuentra en el sitio de T. Los cálculos muestran que los momentos magnéticos de estas estructuras están cambiando entre 5,98 y 8,63Bohr-mag/celda. El Co presenta la energía más baja en el punto H y la peor posición es la T, y sus momentos magnéticos se encuentran entre cero y 4,04Bohr-mag/celda. El Ni presenta momentos de magnetización entre cero y 0,49Bohr-mag/celda, el mejor punto es H y el peor es T. Las estructuras con adsorción de vanadio, cobalto y Niquel presentan los mismos grupos de simetría: D_{3h} y C_{2v} . Las configuraciones fueron simuladas por medio del modelo de placa, que consiste en una supercelda de grafeno de 3x3 y una separación de $\sim 15,0\text{\AA}$, utilizando el código Quantum-Espresso, que se basa en la teoría funcional de la densidad (DFT). Esta supercelda es utilizada con el fin de garantizar que la separación entre las imágenes sea mayor de 4\AA y la auto-interacción sea muy débil. Un uso de una supercelda mayor que 3x3 aumenta el tiempo de cálculo y los cambios entre los resultados son insignificantes. Los cálculos fueron realizados en el DGCTIC-UNAM en los proyectos SC16-1-IR-57. MGMA agradece al proyecto DGAPA-UNAM IN102714-3.

Abstract. New materials with enhanced chemical and physical properties are obtained by means of adsorption of 3d-atoms transition metals (3d-TM) on graphene. Studying of these materials is carried out using the modern Density Functional Theory (DFT) by means of symmetric adsorption of atoms on 3x3 graphene layer. This work concentrates in the adsorption of V, Co and Ni as an initial point to find the main features and the physical and chemical behavior of these structures. Adsorption sites considered are bridges (Br), T and H points which correspond to sites at midpoint between two atoms of carbon (first and second neighbors), above C, and on the center of the hexagon respectively. The specific case of the Vanadium adsorption shows that the most stable point of all the realized

configurations is the Br and that the unstable position is found at T site. Calculations show that the magnetic moments of these structures are changing between 5.98 and 8.63Bohr-mag/cell. The Co presents the lowermost energy in the point H and the worst position is the T, and his magnetic moments are found between zero and 4.04Bohr-mag/cell. The Ni presents moments of magnetization between zero and 0.49Bohr-mag/cell, the best point is H and the worst is T. The structures with adsorption of Vanadium, Cobalt and Ni present the same symmetry groups: D_{3h} and C_{2v} . Configurations are simulated by means of the slab model, which consists a 3x3 graphene supercell and a separation of $\sim 15.0\text{\AA}$, using the Quantum-Espresso code, which is based on Density Functional Theory (DFT). This supercell is used in order to guarantee that the separation between images will be greater than 4\AA and the auto-interaction will be very weak. A use of a supercell greater than 3x3 increases the time of calculation and the changes between results are negligible. Calculations were performed at the DGCTIC-UNAM under projects SC16-1-IR-57. MGMA thanks the DGAPA-UNAM project IN102714-3.

Adsorción y difusión lateral de átomos de C sobre la superficie de wurtzite (0001)-AlN

Adsorption and lateral diffusion of C atoms on wurtzite (0001)-AlN surface

J F Murillo¹, C Ortega López¹, J A Rodríguez Martínez¹, M G Moreno-Armenta³ and N Takeuchi Tan³

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

³ Universidad Autónoma de México, Ciudad de México, México

E-mail: juanfmg1973@gmail.com

Resumen. AlN es un material con un amplio uso en optoelectrónica y dispositivos de alta temperatura. Por otra parte, el grafeno es el material más importante que se usa en las pantallas de visualización, baterías de rápida recarga, almacenamiento de hidrógeno, celdas solares y muchas otras aplicaciones. Generalmente, estas aplicaciones se basan en la combinación de grafeno con otros materiales. Proponemos un nuevo material basado en la unión entre el grafeno y AlN. La superficie (0001) de AlN en la estructura wurtzite es muy interesante debido a sus propiedades electrónicas. Pero el desajuste en 1x1-Wurtzite-AlN(0001)/1x1-grafeno es de aproximadamente de 26,5%. Ese desajuste es inadmisibles en la tecnología. Sin embargo, un desajuste de alrededor de 0,5% se obtuvo en $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ - wurtzite-AlN(0001)/ $\sqrt{19}\times\sqrt{19}$ -grafeno. En este trabajo, estudiamos en primer lugar la adsorción y una difusión lateral de átomos de C, como primer paso para estudiar la interfaz $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ - wurtzite-AlN(0001)/ $\sqrt{19}\times\sqrt{19}$ -grafeno. Los posibles sitios determinados en wurtzite (0001)AlN-Al para adsorber átomos de C son: 1) en la parte superior de Al, este punto se denomina T1; 2) en la parte superior de N, este punto se denomina T4, ya que tiene cuatro posibles átomos para que enlace; 3) Puente 1 entre dos átomos adyacentes; 4) Puente 2 entre dos átomos no adyacentes y 5) H3 en el centro de un triángulo equilátero formado por tres átomos de Al. El cálculo basado en la teoría funcional de la densidad (DFT) muestra que el mejor sitio para poner un átomo de carbono en wurtzite AlN(0001) está en H3 y el siguiente punto es T4 que es superior a 0.24eV. El peor punto es T1. La adsorción de un átomo de C en H3 o en T4 es muy interesante porque la estructura presenta un momento magnético de 1,00 μ_B . Las propiedades electrónicas como bandas de energía de los electrones y los estados de densidad son mostrados. Los cálculos se realizaron en el DGCTIC-UNAM en los proyectos SC16-1-IR-57. MGMA agradece al proyecto DGAPA-UNAM IN102714-3.

Abstract. AlN is a material with wide use in opto electronics and high-temperature electronic devices. By the other hand, Graphene is the most important material that is used in display screens, batteries of very fast recharge, storing hydrogen, solar cells and many many other applications. Generally, these applications are based on combination of graphene with other materials. We propose a new material based on the juncture between graphene and AlN. Surface (0001) of AlN in wurtzite structure is very interesting because its electronic properties. But mismatch in 1x1-Wurtzite-AlN(0001)/1x1-graphene is about 26.5%. That mismatch is inadmissible in technology. But a mismatch of about 0.5% was obtained in $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ - wurtzite-AlN(0001)/ $\sqrt{19}\times\sqrt{19}$ -grafeno. In this work, we study first the adsorption and lateral diffusion of C atoms as a first step to study the interface $\sqrt{3}\times\sqrt{3}$ - wurtzite-AlN(0001)/ $\sqrt{19}\times\sqrt{19}$ -grafeno. Possible sites to adsorb C atoms on wurtzite (0001)AlN-Al determined: 1) on top of Al, this point is called T1; 2) on top of N, this point is called T4 because it has four possible atoms for to bond; 3) Bridge 1 between two adjacent atoms; 4) Bridge 2 between two

no adjacent atoms and 5) H3 at center of an equilateral triangle formed by three atoms of Al. Calculation based on Density Functional Theory (DFT) shows that the best site to put a Carbon atom on wurtzite AlN(0001) is on H3 and the next point is T4 which is 0.24eV higher. The worst point is T1. The adsorption of one C atom on H3 or on T4 is very interesting because the structure exhibits a magnetic moment of $1.00\mu_B$. Electronic properties as electron energy bands and density of states are shown. Calculations were performed at the DGCTIC-UNAM under projects SC16-1-IR-57. MGMA thanks the DGAPA-UNAM project IN102714-3.

Estudio funcional de la densidad acerca de la adsorción de átomos de carbono sobre la superficie hexagonal (0001) BN

Density functional study about the adsorption of carbon atoms on (0001) surface of hexagonal BN

G R Casiano Jiménez¹, C Ortega López¹, J A Rodríguez Martínez¹, M G Moreno-Armenta³ and N Takeuchi Tan³

¹ Universidad de Córdoba, Montería, Colombia

² Universidad Nacional de Colombia, Santafé de Bogotá, Colombia

³ Universidad Autónoma de México, Ciudad de México, México

E-mail: glacaji@gmail.com

Resumen. El nitruro de boro es un compuesto que puede existir en varias estructuras cristalinas como hexagonal (similar al grafito, y es la estructura más estable), wurtzite (es una rara estructura encontrado, pero es posible) y cúbica, que es similar a la del diamante. BN se utiliza normalmente en dispositivos de alta temperatura y es un material prometedor para ser utilizado en la nanotecnología. Queremos estudiar una nueva interfaz entre BN y grafeno. Esa nueva estructura, tiene muchas aplicaciones posibles en la nanotecnología. El estudio comienza con la adsorción de átomos de carbono en la superficie hexagonal (0001) BN, grupo #194 o P63/MMC, que es un material en capas como grafito. La principal interacción se debe a la fuerza de van der Waals. Usamos el código Quantum-Espresso con el fin de calcular la energía total en el marco de la teoría funcional de la densidad. Todos los cálculos fueron realizados usando la aproximación GGA, incluyendo polarización de espín y la interacción de London con el fin de incluir en el cálculo las fuerzas de Van der Waals. Inicialmente, el volumen de BN fue optimizado y obtuvimos 2.510Å para la constante de red y $c/a=2,4671$, valores que están en concordancia con las mediciones experimentales. Con estos valores hicimos una placa de 3x3 y siete capas. Simétricamente, en cada superficie de ambas caras de la placa, ponemos un átomo de carbono en varios sitios como: 1) en la parte superior de B; 2) en la parte superior de N; 3) en el puente entre dos átomos adyacentes de B y N; 4) en el puente entre dos átomos de boro no adyacentes, en frente del átomo de nitrógeno; 5) en el puente entre dos átomos de nitrógeno no adyacentes, delante del átomo de boro; y 6) en el centro del hexágono. El sitio con la mínima energía es el sitio de puente entre dos átomos adyacentes de B y N. Pero cerca hay dos sitios: el primero es en la parte superior del N (0,014eV más alto que el sitio más estable, y el otro, en el puente entre dos átomos de boro no adyacentes en frente de N (mayor a 0.018eV). Un punto muy interesante para investigar y discutir es que el momento magnético es de 4,00 μ Bohr para cualquier sitio de adsorción. En el sitio más estable a la adsorción de C, se presentan las bandas de mínima energía y la densidad de estados. Los cálculos fueron realizados en el DGCTIC-UNAM en los proyectos SC16-1-IR-57. MGMA agradece al proyecto DGAPA-UNAM IN102714-3.

Abstract. Boron nitride is a compound that can exist in several crystalline structures as hexagonal (similar to graphite, and is the most stable structure), wurtzite (it is a rare structure to found, but possible) and cubic, which is similar to diamond. BN is normally used in devices to high-temperature and it is a promising material to be used in nanotechnology. We want to study a new interface between BN and grafeno. That new structure has many possible applications in nanotechnology. The study begins with the adsorption of Carbon atoms on (0001) surface of hexagonal BN, group #194 or P63/mmc, which is a layered material as graphite. The main interaction is due to van der Waals force. We use the code Quantum Espresso in order to calculate the total energy in the frame of the Density

Functional Theory. All calculations were carried out using the GGA approximation, including spin polarization and the London interaction in order to include the van der Waals forces in calculation. Initially, BN in volume was optimized and we obtained 2.510\AA for lattice constant and $c/a = 2.4671$, values that are in a good agreement with experimental measurements. With these values we made a 3×3 slab and seven layers. Symmetrically, on each surface of both faces of the slab, we put one C atom on several sites as: 1) on top of B; 2) on top of N; 3) on bridge between two adjacent atoms of B and N; 4) on bridge between two non-adjacent Boron atoms, in front of Nitrogen atom; 5) on bridge between two non-adjacent Nitrogen atoms, in front of Boron atom; and 6) at center of hexagon. The site with minimum energy is the bridge site between two adjacent atoms of B and N. But near there are two sites: the first is on top of N (0.014eV higher than the most stable site, and other one, on bridge between two non-adjacent Boron atoms in front of N (0.018eV higher). A very interesting point to investigate and to discuss is that the magnetic moment is $4.00 \mu\text{Bohr}$ for any site of adsorption. For the most stable site to adsorption of C, we show the energy bands and the density of states. Calculations were performed at the DGCTIC-UNAM under projects SC16-1-IR-57. MGMA thanks the DGAPA-UNAM project IN102714-3.

Propiedades estructurales y electrónicas de nuevos materiales bidimensional: estudio DFT

Structural and electronic properties of new bidimensional materials: DFT study

A Guerra Gonzalez¹ and J H Díaz Forero¹

¹ Universidad Distrital Francisco José de Caldas, Santafé de Bogotá Colombia

E-mail: aguerrag@unal.edu.co

Resumen. Los sistemas cristalinos bidimensionales son formas de cristalización periódica en la que los átomos o los arreglos periódicos de difusión molecular forman larga gama y corto rango en dos dimensiones. El presente trabajo es un estudio de la pedagógica, donde usan la teoría funcional de la densidad (DFT) para encontrar las propiedades estructurales tales como la energía, el volumen de equilibrio de la celda unitaria y los módulos de volumen. Elos también estudian las propiedades electrónicas tales como la densidad de estados y la estructura de bandas de nuevos cristales bidimensionales como el grafeno, silicilene, phosphorene, molibdenita y tungstenita.

Abstract. The two-dimensional crystalline systems are forms of periodic crystallization in which the atoms or molecular distributed newspapers arrangements forming long and short range in two dimensions. The present work is a study of pedagogical where use of Density Functional Theory (DFT) to found the structural properties as such as energy, the equilibrium volume of the unit cell and the volume modules. They also study the electronic properties such as density of states and band structure of new two-dimensional crystals as graphene, silicilene, phosphorene, molybdenite and tungstenita.

Un estudio de química cuántica del efecto inhibitor de las especies que contienen nitrógeno en la adsorción de moléculas poliaromáticas sobre un sitio ácido de Brønsted

A quantum chemical study of the inhibitory effect of nitrogen containing species in the adsorption of polyaromatic molecules over a Brønsted acid site

C M Celis-Cornejo¹, M M Garnica Mantilla¹ and G E Ramírez-Caballero¹

¹ Universidad Industrial de Santander, Bucaramanga, Colombia

E-mail: ransereg@hotmail.com

Resumen. Para estudiar el efecto inhibitorio de las especies de nitrógeno sobre la adsorción de los hidrocarburos poliaromáticos, fueron realizados cálculos de la teoría funcional de la densidad para simular una superficie del catalizador en la obtención de parámetros de adsorción termoquímicos de los hidrocarburos poliaromáticos y las moléculas orgánicas que contienen nitrógeno. La mordenita fue elegida como la estructura zeolítica para simular el sitio ácido de Brønsted. El carácter del sitio ácido fue confirmado por un cálculo de la frecuencia de vibración y un análisis de carga Bader. A partir de los cálculos de adsorción se encontró que la adsorción de calor incrementa, mientras aumenta el número de anillos aromáticos en la estructura. También el efecto inhibitorio donde atribuyó a la posible competencia por los sitios ácidos entre 2 y 3 miembros de las estructuras de anillos y especies de nitrógeno no básicas.

Abstract. To study the inhibitory effect of the nitrogen species on the adsorption of polyaromatic hydrocarbons, density functional theory calculations was performed to simulate a catalyst surface for obtaining thermochemical adsorption parameters of the polyaromatic hydrocarbons and the organic nitrogen containing molecules. Mordenite was chosen as the zeolitic structure for simulating the Brønsted acid site. The character of the acid site was confirmed by a vibrational frequency calculation and a Bader charge analysis. From the adsorption calculations it was found that the adsorption heat increase while increase the number of aromatic rings in the structure. Also the inhibitory effect where attributed to possible competition for the acid sites between 2 and 3 rings membered structures and non-basic nitrogen species.

Analisis numerico de modelos de celda multiparticula para aleaciones de magnesio (Zc71) reforzados con particulas (SiC)

Numerical analysis of multiparticle cell models for magnesium alloys (Zc71) reinforced with particles (SiC)

R Guzmán López¹

¹ Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

E-mail: rolando.guzman@upb.edu.co

Resumen. Un sólido deformable está formado por infinitos puntos materiales que ocupan una región del espacio tridimensional, y si el sólido es homogéneo cada una de sus propiedades tendrá un valor constante en todos los puntos materiales que lo forman. Los materiales compuestos al contrario están formados por uno o más materiales (ej. matriz de aleación metálica de Magnesio y partículas de SiC), con diferentes propiedades, que pueden ser mecánicas, térmicas o físicas. Estos materiales heterogéneos (caso de los materiales compuestos o de las aleaciones no uniformes), sus propiedades varían de un punto material del sólido a otro. Esto significa que, en un instante de referencia, las propiedades del material son funciones de la posición de cada uno de los puntos materiales que forman el sólido. Los modelos de celda multiparticula permiten la representación de la microestructura de este tipo de materiales compuestos, posibilitando así la obtención numérica de propiedades mecánicas homogeneizadas.

Abstract. A deformable solid is formed by material points infinite which occupy a region of three-dimensional space, and if the solid is homogeneous each of its properties will have a constant value in all material points that form. Unlike composites it is formed by one or more materials (eg. magnesium metal alloy matrix and particles SiC) with different properties, which may be mechanical, thermal or physical. These heterogeneous materials (case of composite materials or alloys nonuniform), their properties vary from in the solid material point to another. This means that, in a reference instant, the material properties are functions of the position of each of the materials points forming the solid. Multi-particles cell models allow the representation of the microstructure of this type of composite materials, thus enabling the obtaining numerical of homogenised mechanical properties.

Simulación de factores de concentración de esfuerzos en discontinuidades combinadas sobre placas planas

Simulation of stress concentration factors in combined discontinuities on flat plates

A Santos Jaimes¹ and R Guzmán López¹

¹ Universidad Pontificia Bolivariana, Bucaramanga, Colombia

E-mail: alfonso.santos@upb.edu.co

Resumen. La determinación de factores de concentración de esfuerzos se ha realizado a través de desarrollos matemáticos y ensayos experimentales, sin embargo, el surgimiento de software de elementos finitos ha abierto una nueva puerta a la obtención de dichos parámetros, tanto para configuraciones geométricas simples, como para discontinuidades combinadas.

Encontrar información referente a los factores de concentración de esfuerzos en placas planas cuando se encuentran sometidas a carga axial y son originadas por discontinuidades geométricas simple como agujeros centrales, filetes y acanaladuras, es bastante sencillo; sin embargo a medida que el número de discontinuidades simples aumenta, o se presentan discontinuidades combinadas, encontrar dichos valores se dificulta hasta el punto que se debe recurrir a la realización de ensayos experimentales o en el mejor de los casos a procesos de simulación a través de software de elementos finitos.

El objetivo de este trabajo fue determinar factores de concentración de esfuerzos mediante la utilización de un software de elementos finitos, ANSYS; para lograrlo se realizaron las siguientes actividades: ensayos de tracción en láminas planas, de acero estructural A36, para determinar las propiedades mecánicas del material que se utilizaron en las simulaciones; validación del software de elementos finitos; determinación de los esfuerzos máximos en las discontinuidades presentes en placas planas con discontinuidades combinadas, a través de simulaciones y utilizando la teoría de falla de la energía de distorsión; por último se calculó y graficó los factores de concentración de esfuerzos.

El resultado del proyecto fue la validación del software ANSYS para la determinación de factores de concentración en placas planas con un agujero central sometido a carga axial; ya que se pudo demostrar estadísticamente que no existen diferencias significativas entre los datos teóricos y los datos obtenidos a través de la simulación. El error máximo calculado entre estos datos fue de 5.42%, cuando la relación geométrica entre el diámetro del agujero y el ancho de la lámina es de 0.04.

También se obtuvieron las gráficas de factores de concentración de esfuerzos para placas planas con agujero central – acanaladura y agujero central – filete, bajo el mismo tipo de carga y ubicados de manera simultánea sobre la misma sección transversal; se observa que en las dos tipos de discontinuidades simultaneas estudiadas, el factor de concentración disminuyen en la medida en que la relación entre el radio de la discontinuidad y el ancho de la placa, aumenta; lo cual concuerda con el comportamiento que se presenta cuando se tiene una sola discontinuidad en la sección transversal.

Abstract. Determining concentration factors is effort was made through mathematical developments and experimental tests, however, the emergence of finite element software has opened a new door to obtain these parameters, both for simple geometric configurations, as for combined discontinuities.

Find information regarding stress concentration factors in flat plates when they are subjected to axial load and are caused by simple geometric discontinuities such as center holes, fillets and grooves, it is quite simple; however as the number of simple discontinuities increases, or combined discontinuities occur, find these values is difficult to the point that one must resort to conducting experimental trials or in the best case to simulation processes through finite element software.

The aim of this study was to determine stress concentration factors using finite element software, ANSYS; to achieve the following activities were carried out., A36 structural steel, tensile tests on flat sheets to determine the mechanical properties of the material used in the simulations; validation of finite element software; determining maximum efforts on the discontinuities present in flat plates with discontinuities combined, through simulations and using the theory of power failure distortion; finally it was calculated and plotted the stress concentration factors.

The result of the project was ANSYS software validation for determining concentration factors in flat plates with a central hole subjected to axial load; since it was proved statistically that there are no significant differences between the theoretical data and data obtained through simulation. The maximum error between these data was calculated 5.42%, when the geometric relationship between the hole diameter and the width of the sheet is 0.04.

Also were obtained graphs of stress concentration factors for flat plates with central hole - groove and central hole - fillet, under the same type of load and placed simultaneously on the same cross section; It shows that in two types of simultaneous discontinuities studied, the concentration factor decreases to the extent that the relationship between the radius of the discontinuity and the plate width, increases; which is consistent with the behavior that occurs when it has a single discontinuity in the cross section.

Simulación Monte Carlo de las propiedades ferroeléctricas de películas delgadas de doble perovskita multiferroica ($\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$)

Monte Carlo simulation of ferroelectric properties double-perovskite multiferroic ($\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$) thin films

H Duque-Sanchez¹, J D Ocampo¹ and F Mesa¹

¹ Universidad Tecnológica de Pereira, Pereira, Colombia

E-mail: femesa@utp.edu.co

Resumen. El uso de métodos de Monte Carlo, fue estudiado en la conmutación de la propiedad magnética de las nanopartículas activada térmicamente. El análisis se aplica a nanopartículas de doble perovskita $\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$ (BFCO), y los resultados se compararon con las propiedades del material estandar. El modelo se basa en un clásico Heisenberg-hamiltoniano de tres dimensiones que implica la presencia de iones y sus interacciones con el vecino más cercano. Para este modelo, se emplearon muestras de la red cúbica simple. Se simularon nanopartículas con diámetros entre 2.1316nm (8 iones) y 10.242nm (24 iones). Un cambio en la temperatura de transición ($T_c=240\text{K}$) se observó con respecto al valor de relleno. Este cambio se debe a la anisotropía de la superficie, que puede ser explicada por la teoría de escala de tamaño finito..

Abstract. Using Monte Carlo methods, the thermally activated magnetic property switching of nanoparticles was studied. The analysis was applied to nanoparticles of Double-perovskite $\text{Bi}_2\text{FeCrO}_6$ (BFCO), and the results were compared with bulk material properties. The model is based on a three-dimensional classical Heisenberg-Hamiltonian involving the presence of ions and their nearest-neighbor interactions. For this model, simple cubic lattice samples were employed. Nanoparticles with diameters between 2.1316nm (8 ions) and 10.242nm (24 ions) were simulated. A shift in the transition temperature ($T_c=240\text{K}$) was observed with respect to the bulk value. This shift is due to the surface anisotropy, which can be explained by the finite size scaling theory.

Caracterización termomecánica de un material compuesto de matriz de polietileno de alta densidad reforzado con nanotubos de titanato

Thermomechanical characterization of a high density polyethylene matrix composite reinforced with titanate nanotubes

G Carrillo¹, S Galeas¹, O Campaña¹, P Pontón², B Marinkovic², M Aldás¹ and V H Guerrero¹

¹ Escuela Politécnica Nacional, Quito, Ecuador

² Universidad Pontificia Católica de Río de Janeiro, Rio de Janeiro, Brasil

E-mail: magacar06@gmail.com

Resumen. En este trabajo se usó extrusión y moldeo por inyección para obtener materiales compuestos de polietileno de alta densidad reforzado con nanotubos de titanato con fracciones en peso comprendidas entre 0.5 y 4%. Con la finalidad de mejorar la interacción entre los componentes del material compuesto, se analizaron los métodos de dispersión mecánica y química, así como también, el efecto del polietileno maleizado y del viniltrimetoxisilano como agentes compatibilizantes. Las propiedades mecánicas se evaluaron mediante ensayos de tracción, flexión, impacto y dureza, mientras que, las propiedades térmicas se evaluaron mediante análisis termogravimétrico (TGA), calorimetría diferencial de barrido (DSC) y análisis termomecánico (TMA). Se confirmó la presencia de los nanotubos de titanato en la matriz polimérica mediante espectroscopia de infrarrojo (FTIR), difracción de rayos X (DRX) y microscopia electrónica de barrido (SEM).

Abstract. In this work was used the extrusion and molding injection to obtain composite materials of HDPE (High Density Polyethylene) reinforced with titanate nanotubes with weight fractions between 0.5 and 4%. In order to improve interaction between the components of the composite material, methods of mechanical and chemical dispersion were analyzed, as well as the effect of maleinized polyethylene and vinyltrimethoxysilane as compatibilizing agents. Mechanical properties were evaluated by tensile, flexural, impact and hardness, while the thermal properties were evaluated by thermogravimetric analysis (TGA), differential scanning calorimetry (DSC) and thermomechanical analysis (TMA). the presence of titanate nanotubes in the polymer matrix by infrared spectroscopy (FTIR), X-ray diffraction (XRD) and scanning electron microscopy (SEM) was confirmed.

Sponsor

Universidad
Industrial de
Santander



www.sysingenieria.co

HORIBA
Scientific



AIST-NT
Advanced Instrumentation Technology for Non-Destructive Testing

 **Spectra-Physics**
A Newport Company

 **Newport**
Experience | Solutions

Partner