



INSTITUTO DE INVESTIGACIONES EN MATERIALES / DEPTO DE MATERIA CONDENSADA Y CRIOGENIA

*Proyecto SC16-1-IR-68*

*Informe de resultados 2016*

# Estudio de las propiedades, electrónicas, térmicas y magnéticas de sistemas cristalinos y de baja dimensionalidad

---

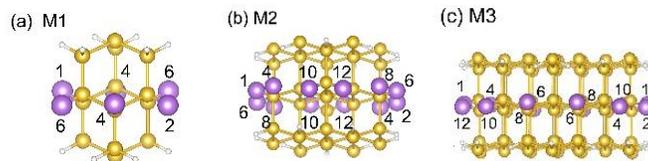
## Resumen

Las propiedades de los nanomateriales están determinadas por la mecánica cuántica. Su estudio se ha intensificado desde que se observó la cuantización de la conductividad eléctrica en 1988. Actualmente, se han tenido avances importantes en la comprensión y control de muchas de sus propiedades, así como en los métodos experimentales para sintetizarlos, teniendo como resultado una serie de aplicaciones tecnológicas en medicina, energías alternativas, dispositivos optoelectrónicos y dispositivos termoeléctricos. La baja dimensionalidad de los nanomateriales evidencia el efecto del confinamiento cuántico, permitiendo controlar la longitud de onda de las excitaciones elementales como los electrones y fonones. Por otro lado, el tipo de átomos en la superficie del nanomaterial, modifica las propiedades electrónicas, térmicas y mecánicas de los mismos. Particularmente, la búsqueda de energías renovables, ha motivado el estudio de las baterías de litio (Li) por la comunidad científica. La nueva generación de baterías de Li, basadas en nanomateriales, prometen una mayor capacidad de almacenamiento y eficiencia energética, así como un tiempo de vida útil mayor a 10 años, abriendo la posibilidad de incorporarlas como dispositivos de almacenamiento a gran escala, en vehículos eléctricos y en dispositivos médicos alojados en el interior del cuerpo humano. Por otro lado, el control del transporte térmico, en la escala nanométrica, permitirá diseñar materiales capaces de controlar el flujo de calor (corrientes térmicas). Durante el desarrollo de este proyecto, se realizó un estudio teórico, usando la teoría del funcional de la densidad (DFT), de las propiedades mecánicas de nanoalambres semiconductores de silicio (Si) y germanio (Ge) con Li superficial e intersticial. Asimismo, se estudiaron las propiedades vibracionales y de transporte térmico en nanoalambres semiconductores de Si.

## Avances de la investigación

### *Propiedades Electrónicas y Mecánicas de nanoalambres de Si*

Durante el desarrollo del presente proyecto se estudiaron las propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres de Si pasivados con hidrógeno (H), crecidos en la dirección cristalográfica [111]. Usando el código SIESTA, se determinó la estructura electrónica de bandas y el módulo de Young de los nanoalambres de Si como función de su diámetro y de la concentración de átomos de Li en la superficie. Las morfologías estudiadas se presentan en la Fig. 1. Los resultados muestran, que la brecha de energía disminuye como función del diámetro del nanoalambre -confinamiento cuántico- y como función de la concentración de Li en la superficie, para todos los casos estudiados, los nanoalambres optimizados conservaron su carácter semiconductor.



**Fig. 1.** Vista lateral de las celdas unitarias, no relajadas, de nanoalambres de Si crecidos en la dirección [111]. Las morfologías M1, M2 y M3 se estudian como función de la concentración de Li en la superficie. Las esferas amarillas, blancas y violetas representan átomos de Si, H y Li respectivamente. Los números en los átomos de Li indican la secuencia seguida en la sustitución de átomos de H por Li.

Adicionalmente, se determinó el módulo de Young ( $Y$ ) de estos sistemas. Los resultados muestran que  $Y$  se incrementa alrededor de un 15 % al aumentar la concentración de átomos de Li en la superficie para las morfologías M2 y M3, mientras que para la morfología M1  $Y$  permaneció casi constante. Estos resultados revelan que estos materiales podrían incorporarse como electrodos (ánodo) en las baterías de Li por su resistencia mecánica y por su comportamiento semiconductor aún con Li en la superficie.

### *Propiedades Térmicas de nanoalambres de Si*

Se investigaron las propiedades térmicas de un nanoalambre de Si pasivado con H, con un diámetro de 7.18 Å y un tamaño de celda unitaria de 9.594 Å, como se muestra en la Fig. 2,



**Fig. 2.** Morfología optimizada del nanoalambre de Si pasivado con H.

Para este estudio se usó el código *quantum espresso*, se determinó la estructura de bandas fonónica, la densidad de estados vibracional, el calor específico, las constantes de fuerza entre pares de átomos y la conductividad térmica. Esta última, usando el formalismo de Landauer dentro de la aproximación armónica. Los resultados muestran que en la región de bajas temperaturas el calor específico y la conductividad térmica crecen lineales con la temperatura, en comparación con el Si en bulto donde ambas propiedades crecen como el cubo de la temperatura. Adicionalmente, se observó que la conductividad térmica disminuye como función de la longitud del nanoalambre.

### *Propiedades Electrónicas y Mecánicas de los compuestos $MoB_n$*

Usando el código quantum espresso se está estudiando el compuesto  $MoB_2$  a fin de obtener sus propiedades electrónicas y mecánicas. Estos cálculos son muy recientes y se encuentran en etapa de pruebas, pues se está optimizando la estructura en bulto con las aproximaciones de la densidad local (LDA) y gradiente conjugado (GGA). Asimismo, se están probando diferentes pseudopotenciales que permitan comparar adecuadamente con resultados experimentales. En una siguiente etapa se espera obtener las constantes elásticas del material, para ello se debe calcular la estructura fonónica de bandas.

## **Participantes en el proyecto**

### **Investigadores**

1. Dr. Raúl Escamilla Guerrero, IIM-UNAM
2. Dr. Francisco Morales Leal, IIM-UNAM
3. Dr. Martín Romero Martínez, FC-UNAM
4. Dr. Fernando Salazar Posadas, ESIME-IPN

### **Estudiantes**

1. Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, ESIME-IPN (Maestría)
2. Sarita Peláez Martínez, ESIME-IPN (Maestría)
3. Armando González Macías, ESIME-IPN (Maestría)
4. Enrique Omar Guevara López, ESIME-IPN (Maestría)

## Productos obtenidos

Como resultado de este proyecto de investigación, los resultados obtenidos se pueden dividir en dos rubros:

### Formación de recursos humanos

El estudiante **Alejandro de Jesús Herrera Carbajal**, obtuvo el grado de *Maestría en Ciencias de Ingeniería en Sistemas Energéticos* con la tesis titulada “Conductividad térmica en un nanoalambre semiconductor de silicio en la dirección cristalográfica [111] usando el formalismo de Landauer” en julio de 2016.

La estudiante **Sarita Peláez Martínez**, actualmente cursa el cuarto semestre de la *Maestría en Ciencias de Ingeniería en Sistemas Energéticos* e investiga las propiedades térmicas de materiales semiconductores usando el código quantum espresso.

El estudiante **Armando González Macías**, actualmente cursa el tercer semestre de la *Maestría en Ciencias de Ingeniería en Sistemas Energéticos* e investiga las propiedades mecánicas de nanoalambres semiconductores con Li intersticial y superficial, usando el código SIESTA.

El estudiante **Enrique Omar Guevara López**, actualmente cursa el primer semestre de la *Maestría en Ciencias de Ingeniería en Sistemas Energéticos* e investiga las propiedades electrónicas de materiales cerámicos y semiconductores, usando el código quantum espresso.

### Participación en congresos

Como resultado de la investigación de este proyecto se presentaron algunos resultados parciales en los siguientes congresos:

1. **MicroEchem 2016 Energy Storage Discussion** con el trabajo “*Effects of surface passivation by lithium on the mechanical and electronic properties of silicon nanowires*” celebrado en la ciudad de Amealco de Bonfil, Querétaro, México, del 6 al 9 de noviembre.
2. **MicroEchem 2016 Energy Storage Discussion** con el trabajo “*Density functional study of Si and Ge nanowires as potential Li storage materials*” celebrado en la ciudad de Amealco de Bonfil, Querétaro, México, del 6 al 9 de noviembre de 2016.
3. **NANOTECH**, con el trabajo “*Lattice thermal conductivity by the Kubo-Greenwood formula applying Green function and the Landauer formalism in Au<sub>13</sub> cluster and silicon nanowire*” celebrado en Puerto Vallarta, Jalisco, México del 14 al 18 de noviembre de 2016.

4. **5ª Reunión Anual de la División de Estado Sólido**, con el trabajo “*Estudio teórico de las propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres semiconductores con litio superficial e intersticial*”, celebrado en Morelia, Michoacán, México de 1 al 3 de diciembre de 2016.
5. **5ª Reunión Anual de la División de Estado Sólido**, con el trabajo “*Formalismo de Landauer para el estudio de la conductividad térmica en sistemas nanoestructurados*”, celebrado en Morelia, Michoacán, México de 1 al 3 de diciembre de 2016.

## Publicaciones

1. R. Escamilla, L. Huerta, M. Romero, E. Verdin, and A. Durán. Evidence of mixed valence Cr<sup>+3</sup>/Cr<sup>+4</sup> in Y<sub>1-x</sub>CaxCrO<sub>3</sub> polycrystalline ceramics by X-ray photoelectron spectroscopy. **J Mater Sci (2017) 52:2889–2894. (fi = 2.30) DOI 10.1007/s10853-016-0582-4.**
2. R. Escamilla, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson, F. Morales, L. Huerta, and E. Verdin. XPS study of the electronic density of states in the superconducting Mo<sub>2</sub>B and Mo<sub>2</sub>BC compounds. **Journal of Materials Science 51 (2016) 6411-6418. (fi = 2.30) DOI 10.1007/s10853-016-9938-z**
3. R. Escamilla, E. Carvajal, M. Cruz-Irisson, M. Romero, R. Gomez, V. Marquina, D.H. Galvan, A. Duran. First-principles study of the structural, elastic, vibrational, thermodynamic and electronic properties of the Mo<sub>2</sub> B intermetallic under pressure. **Journal of Molecular Structure (2016), (fi = 1.8) doi: 10.1016/j.molstruc.2016.07.004**

Atentamente



---

Dr. Raúl Escamilla Guerrero

Investigador Titular A de T. C.

Instituto de Investigación en Materiales, UNAM