Informe del Uso de Supercómputo en 2016-2017

-presentado por el Dr. Chumin Wang Chen

En los últimos 12 meses, con el apoyo de supercómputo de la UNAM hemos estudiado el transporte electrónico y fonónico en cuasicristales, la superconductividad anisotrópica, así como excitaciones elementales en materiales porosos. En particular, la alumna **Marisol Rodríguez Arcos** concluyó bajo mi supervisión su tesis de maestría y obtuvo el grado de Maestra en Ciencias e Ingeniería de Materiales de la UNAM el día 5 de agosto de 2016. Asimismo, los principales resultados de nuestra investigación han sido resumidos en tres artículos publicados y uno aceptado para su publicación en revistas indexadas, así como uno publicado y uno aceptado en la nueva revista MRS Advances. Adicionalmente, nuestros resultados más recientes han sido incluidos en los tres artículos enviados para su publicación. Cabe mencionar que cada uno de estas nueve publicaciones contiene un agradecimiento explícito al uso de supercómputo de la UNAM. Dichos artículos son:

1. L.A. Pérez, C.G. Galván y C. Wang,
   "Vortices in Hubbard Superconductors: A Bogoliubov-de Gennes Approach",
   Journal of Superconductivity and Novel Magnetism **29**, 285-288 (2016).
2. C.G. Galván, J.M. Cabrera-Trujillo, L.A. Pérez y C. Wang,
   "A Bogoliubov-de Gennes study of nanoscale Hubbard superconductors",
   Physica Status Solidi B **253**, 1638-1642 (2016).
3. F. Sánchez, V. Sánchez y C. Wang,
   "Renormalization Approach to the Electronic Localization and Transport in Macroscopic Generalized Fibonacci Lattices",
   Journal of Non-Crystalline Solids **450**, 194-208 (2016).
4. V. Sánchez, F. Sánchez, C. Ramírez y C. Wang,
   "Non-perturbative Analysis of Impurity Effects on the Kubo Conductivity of Nano to Macroscopic Structures",
   Materials Research Society Advances **1** (24), 1779-1784 (2016).
5. J. E. González, V. Sánchez y C. Wang,
   "Improving Thermoelectric Properties of Nanowires through Inhomogeneity",
   Journal of Electronic Materials (2017) doi: 10.1007/s11664-016-4946-y
6. J.E. González, V. Sánchez y C. Wang,
   "Thermoelectricity in Periodic and Quasiperiodically Segmented Nanobelts and Nanowires"
   Materials Research Society Advances (2017) doi:10.1557/adv.2016.291
7. M. R. Arcos y C. Wang,
   "Fluorine Etching in Porous Silicon: An Ab-Initio Molecular Dynamics Study",
   (enviado a *Electrochemical Society Journal of Solid State Science and Technology*, 2017)
8. M. Oliva-Leyva y C. Wang,
   "Low-Energy Theory for Strained Graphene: An Approach up to Second-Order in the Strain Tensor",
   (enviado a *Journal of Physics: Condensed Matter*, 2017)
9. I. Ziti, M. R. Britel y C. Wang,
   "Atomic-Orbital and Plane-Wave Approaches to Ferromagnetic Properties of Ni_xFe_{1-x} Nanowires"
   (enviado a *Materials Research Society Advances*, 2017)

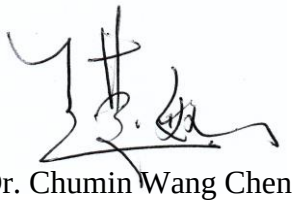
En paralelo, algunos resultados de nuestra investigación obtenidos en 2016 fueron presentados en los siguientes congresos nacionales e internacionales.

1. "Ecuaciones de Bogoliubov-de Gennes: Una descripción local de la superconductividad" **Conferencia Invitada** en el evento *105 años de Superconductividad*, Instituto de Física, UNAM, México (Abril 8, 2016). Participante: Chumin Wang.
2. "Etching Process in Porous Silicon: An ab-initio Molecular Dynamics Study" (ganador del premio al mejor poster) en *Car-Parinello Molecular Dynamics in 2016*, Institute for Molecular Engineering, The University of Chicago, IL, U.S.A. (Mayo 18-21, 2016). Participante: Marisol Rodríguez Arcos.

3. “Improving Thermoelectric Properties of Nanowires through Inhomogeneity” en *35th Annual International Conference on Thermoelectrics*, Wuhan, China (Mayo 29 - Junio 2, 2016). Participante: José Eduardo González Mireles.
4. “Electronic Transport in Non-Crystalline Solids” **Conferencia Invitada** en *The 3rd Conference on Physical Chemistry*, Nanjing, China (Junio 1-3, 2016). Participante: Chumin Wang.
5. “Transporte Electrónico en Nanoalambres Aperiódicos” **Conferencia Invitada** en *el VIII Workshop México-Chile sobre el Magnetismo, Nanociencias y sus Aplicaciones*, Playa del Carmen, Q.R., México (Agosto 18-21, 2016). Participante: Chumin Wang.
6. “Thermal and Electrical Conductivities of Segmented Nanowires” **Conferencia Invitada** en *EMN Meeting on Materials Chemistry*, Budapest, Hungría (Sept. 9-13, 2016). Participante: Chumin Wang.
7. “HTSC y Simetría d” minicurso impartido dentro de la Escuela *Superconductividad*, Instituto de Física, UNAM, México (Octubre 24-27, 2016). Participante: Chumin Wang.
8. “A Proposal of Core-Shell Segmented Nanowires with High Thermoelectric Efficiency” en *Materials Research Society 2016 Fall Meeting*, Boston, MA, U.S.A. (Nov. 27 - Dic. 2, 2016). Participante: José Eduardo González Mireles.

En resumen, el apoyo de supercómputo ha sido fundamental para nuestra investigación, ya que en particular la Ciencia de Materiales requiere modelos microscópicos mediante cálculos numéricos capaces de predecir fenómenos cuánticos medibles en el laboratorio. Cabe mencionar que actualmente hay cuatro estudiantes de doctorado y uno posdoctoral desarrollando bajo mi supervisión su respectiva investigación. La mayor parte de estas investigaciones requiere el uso de cómputo de alto rendimiento.

Atentamente



Dr. Chumin Wang Chen
Investigador titular C de tiempo completo
Instituto de Investigaciones en Materiales, UNAM