

Reporte de resultados Proyecto de Supercómputo 2016

presentado por el

Dr. Luis Antonio Pérez López

Investigador Titular “B” de T.C.
Instituto de Física, UNAM

Resumen

Investigamos el efecto del confinamiento cuántico y de un campo magnético externo en la brecha superconductora de materiales bidimensionales utilizando un modelo de Hubbard y el formalismo de Bogoliubov-de Gennes.

Asimismo, continuamos el estudio teórico de las propiedades estructurales y electrónicas de nanoalambres semiconductores y nanocúmulos bimetálicos por medio de la teoría del funcional de la densidad.

Avances

En este año continuamos la investigación de las propiedades termodinámicas de superconductores no convencionales bidimensionales, a partir del modelo de Hubbard. Usando el formalismo de Bogoliubov-de Gennes, estudiamos la formación de vórtices en materiales con brechas superconductoras con simetría s , s extendida y d sometidos a un magnético campo externo. Usando este mismo formalismo, investigamos la variación espacial de la brecha superconductora en arreglos bidimensionales de nanogranos superconductores como función del tamaño de grano para diferentes tipos de frontera intergrano (metálica, aislante o superconductora).

Los resultados de estas investigaciones aparecen reportados en los siguientes artículos (con agradecimiento al Departamento de Supercómputo de la DGTIC):

1. L.A. Pérez, C.G. Galván, 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, C. Wang, “*A Bogoliubov-de Gennes study of nanoscale Hubbard superconductors*”, Physica Status Solidi B **253**, 1638-1642 (2016).

Por otra parte, usando la teoría del funcional de la densidad, investigamos teóricamente las propiedades electrónicas tales como la estructura de bandas, brecha semiconductor y estabilidad energética de nanoalambres de carburo de silicio pasivados con flúor. Asimismo, investigamos teóricamente los efectos de átomos de litio superficiales en las propiedades electrónicas (estructura de bandas, brecha semiconductor) y mecánicas (módulo de Young) de nanoalambres de silicio. Los resultados de estos estudios aparecen reportados en los siguientes artículos (con agradecimiento al Departamento de Supercómputo de la DGTIC):

3. A. Miranda*, L.A. Pérez, “*Electronic properties of fluorinated silicon carbide nanowires*”, Computational Materials Science **111**, 294 (2016). (*Investigador posdoctoral bajo mi supervisión)
4. F. Salazar, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, “*Effects of surface passivation by lithium on the mechanical and electronic properties of silicon nanowires*”, Solid State Communications **247**, 6-11 (2016).

Cálculos realizados

Para el estudio teórico de superconductores no convencionales, usamos programas escritos en Fortran que resuelven ecuaciones matriciales de manera autoconsistente, lo que involucra diagonalizaciones de matrices de $2N \times 2N$, donde $N \times N$ es el número de átomos o sitios de una supercelda bidimensional, así como cálculos integración numérica en el espacio recíproco (primera zona de Brillouin de la supercelda). Las superceldas consideradas varían entre 100 y 400 sitios, y el cálculo correspondiente varía entre 30 minutos y 16 horas. Considerando un tiempo aproximado de 200 horas por curva de brecha superconductor versus temperatura para valores fijos de los demás parámetros del modelo, estimamos un tiempo total de 6000 horas de CPU para obtener 30 curvas y analizarlas posteriormente.

Por otra parte, para el estudio *ab initio* de nanoalambres semiconductores y nanocúmulos bimetálicos usamos los programas SIESTA y QuantumEspresso. En este contexto, se realizaron relajaciones estructurales y cálculos de energía de celdas unitarias de diferentes diámetros y composiciones con decenas o cientos de átomos. Asimismo, para obtener las propiedades mecánicas (como el módulo de Young) de nanoalambres se realizaron cálculos similares pero bajo diferentes esfuerzos aplicados.

Software utilizado

Fortran
SIESTA
QuantumEspresso

Recursos utilizados

600,000 horas de CPU

Colaboradores

Investigadores	Alumnos
Dr. Alvaro Miranda Durán (IPN)	M. en C. Laura M. Jiménez Díaz (PCeIM-UNAM)
Dr. Fernando Salazar Posadas (IPN)	Fís. Moises Fabian Ramírez Lara (PCF-UNAM)
Dr. Miguel Cruz Irisson (IPN)	
Dr. José Samuel Millán Malo (UNACAR)	
Dr. José Manuel Cabrera Trujillo (UASLP)	

Artículos publicados

1. L.A. Pérez, C.G. Galván, 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, C. Wang, “*A Bogoliubov-de Gennes study of nanoscale Hubbard superconductors*”, Physica Status Solidi B **253**, 1638-1642 (2016).
3. A. Miranda, L.A. Pérez, “*Electronic properties of fluorinated silicon carbide nanowires*”, Computational Materials Science **111**, 294 (2016).
4. F. Salazar, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, “*Effects of surface passivation by lithium on the mechanical and electronic properties of silicon nanowires*”, Solid State Communications **247**, 6-11 (2016).

Alumnos graduados

En cuanto a la formación de recursos humanos, en este período concluí con la dirección de la siguiente tesis de Doctorado en Ciencias (Física), la cual pudo llevarse a cabo gracias a los recursos de supercómputo de la DGTIC:

- “*Sistemas de transporte de partículas en una dimensión*” por Heinrich Fidencio Terborg del Rosal, alumno del Posgrado en Ciencias Físicas de la UNAM. Fecha del Examen de Grado: 7 de septiembre de 2016. Nivel: **Doctorado**.

Congresos nacionales e internacionales

Cabe mencionar que el responsable de este proyecto impartió las siguientes *pláticas* donde se muestran los avances de diferentes líneas de investigación, todos ellos obtenidos gracias a los recursos de supercómputo de la UNAM:

1. “*Termodinámica de superconductores con simetrías s , p y d* ” en el Simposio Conmemorativo de los 105 años del Descubrimiento de la Superconductividad, Instituto de Física, UNAM (8 de abril de 2016).
2. “*Modelos de influencia social con repulsión*” en el Simposio Perspectivas en Sistemas Complejos: Los próximos 10 años, Instituto de Física, UNAM (8 de junio de 2016).
3. “*Física y aplicaciones de nanomateriales*” en la reunión Ciencia y Humanismo II, Academia Mexicana de Ciencias (24 de agosto de 2016).
4. “*Superconducting Nanoclusters: A Bogoliubov-de Gennes Approach*” (**Plática invitada**), 3rd Meeting of the American Initiative on Metal Clusters and Nanoalloys, Monterrey, Nuevo León, México (octubre 27-29, 2016).

Asimismo, los resultados de nuestras investigaciones en superconductores no convencionales, cúmulos atómicos y nanoalambres semiconductores, obtenidos con la

ayuda de la supercomputadora Miztli, fueron resumidos en los siguientes trabajos presentados congresos nacionales e internacionales:

5. L. A. Pérez, C. G. Galván, J. M. Cabrera-Trujillo, C. Wang, “*Nanostructured Hubbard superconductors: A Bogoliubov-de Gennes approach*” en Spectroscopies in Novel Superconductors 2016, Ludwigsburg, Alemania (Junio 29-24, 2016).
6. L. A. Pérez, H. Terborg, “*Effects of Non-Uniform Occupancy on Selective Transport Through Nanochannels*” en StatPhys26, Lyon, Francia (Julio 18-26, 2016).
7. C.G. Galván, J.M. Cabrera-Trujillo, L. A. Pérez, C. Wang, “*Nanostructured Hubbard superconductors in the Bogoliubov-de Gennes formalism*” en XXV International Materials Research Congress (Cancún, México, agosto 15-19 de 2016).
8. C.G. Galván, L.A. Pérez, J.M. Cabrera-Trujillo, “*Funcionalización de nanopartículas de oro a partir de dinámica molecular reactiva*” LVIII Congreso Nacional de Física (León, Guanajuato, México, 2-7 octubre de 2016).
9. L. F. Mendoza, F. Salazar, M. Cruz-Irisson, L. A. Pérez, “*Estudio teórico del calor específico y conductividad térmica en un cúmulo de Au₁₃ usando cálculos de primeros principios y la fórmula de Kubo-Greenwood*” LVIII Congreso Nacional de Física (León, Guanajuato, México, 2-7 octubre de 2016).
10. A. Miranda, E. Carvajal, L. A. Pérez, M. Cruz-Irisson, “*Dopaje molecular en nanoalambres de Si: efectos de los halógenos en la superficie*” LVIII Congreso Nacional de Física (León, Guanajuato, México, 2-7 octubre de 2016).
11. A. González-Macías, F. Salazar-Posadas, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, “*Effects of surface passivation by lithium on the mechanical and electronic properties of silicon nanowires*” en el ISE Sponsored Meeting MicroEchem 2016 / Energy Storage Discussions (Amealco de Bonfil, Queretaro, México, 6-9 de noviembre de 2016).
12. A. González-Macías, F. Salazar-Posadas, A. Trejo-Baños, M. Cruz-Irisson, L. A. Pérez, “*Density functional study of Si and Ge nanowires as potential Li storage materials*” en el ISE Sponsored Meeting MicroEchem 2016 / Energy Storage Discussions (Amealco de Bonfil, Queretaro, México, 6-9 de noviembre de 2016).
13. S. Peláez-Martínez, L. F. Mendoza-Villegas, J.A. Herrera-Carvajal, F. Salazar-Posadas, M. Cruz-Irisson, L. A. Pérez “*Lattice thermal conductivity by the Kubo-Greenwood formula applying Green function and the Landauer formalism in Au₁₃ cluster and silicon nanowire*”, NanoTech 2016, (Puerto Vallarta, Jalisco, México, 14-18 de noviembre de 2016).
14. A. Miranda, I. González, A. Trejo, F. A. Perdomo-Hurtado, L.A. Pérez, M. Cruz-Irisson, “*Chemical band-gap engineering in fluorinated silicon nanowires*”, 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (Montevideo, Uruguay, 20-25 de noviembre de 2016).
15. A. Miranda, F. de Santiago, A. Trejo, E. Carvajal, L.A. Pérez, “*Chemical sensing in silicon nanowires: quantum confinement effects*”, 42nd International Congress of Theoretical Chemists of Latin Expression (Montevideo, Uruguay, 20-25 de noviembre de 2016).
16. S. Peláez-Martínez, M. C. Crisóstomo-Reyes, A. Miranda-Durán, Fernando Salazar-Posadas, Miguel Cruz-Irisson, Luis A. Pérez “*Formalismo de Landauer para el estudio de la conductividad térmica en sistemas nanoestructurados*”, en la 5a Reunión Anual de la División de Estado Sólido de la SMF (Morelia, Michoacán, México, 1-3 de diciembre de 2016).

17. A. González-Macías, M. C. Crisóstomo-Reyes, A. Trejo, F. Salazar, M. Cruz-Irisson, L.A. Pérez, “*Estudio teórico de las propiedades electrónicas y mecánicas de nanoalambres semiconductores con litio superficial e intersticial*” en la 5a Reunión Anual de la División de Estado Sólido de la SMF (Morelia, Michoacán, México, 1-3 de diciembre de 2016).