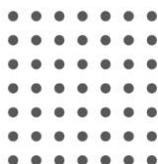


# MEMORIAS



**EVENTO GRATUITO**

## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES

Simulación de nanomateriales - Microscopía avanzada - Aleaciones de alta entropía - Materiales aeroespaciales - Quiralidad en nanopartículas - Cerámicos nanoestructurados - Materiales de construcción - Machine learning en materiales

- Conferencias
- Talleres
- Ponencias



**5 al 7  
Abril 2022**

Inscripción:

<https://bit.ly/3JEb6Wf>

INSTITUCIONES PARTICIPANTES





# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



## ***CONTENIDO***

### INSTITUCIONES PARTICIPANTES



LOS MOCHIS, SINALOA, MÉXICO; 5 AL 7 DE ABRIL DE 2022.



# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



## CONTENIDO

	Página
Presentación	5
Programa	7
<b>Conferencias (C)</b>	10
C1 Quiralidad en la nanoescala, <b>Ignacio Luis Garzón-Sosa</b>	11
C2 Aprovechamiento de la energía solar concentrada en la síntesis de cerámicos nanoestructurados, <b>Laura Guadalupe Ceballos-Mendivil</b>	12
C3 De la física-termodinámica a la física-mecánica en las aleaciones de alta entropía, <b>Francisco Javier Baldenebro-López</b>	13
C4 Advanced electron microscopy as tool for discovery in materials physics, <b>Miguel José Yacamán</b>	14
C5 Materiales aeroespaciales para aplicaciones terrestres y extraterrestres, <b>Olivia A. Graeve</b>	15
C6 Materiales nanométricos: del universo virtual a la vida real, <b>Álvaro Posada-Amarillas</b>	16
C7 Desarrollo de sensores colorimétricos para la detección de iones metálicos mediante la funcionalización de nanopartículas de oro y plata, <b>José de Jesús Campos-Gaxiola</b>	17
C8 Estudio de las propiedades de nanopartículas basadas en el $I-Au_{60}$ , <b>Xóchitl López-Lozano</b>	18
C9 Vacancy generation of copper surface by STM tunneling electrons due to the indigo-substrate interaction, <b>Carlos Javier Villagómez-Ojeda</b>	19
<b>Ponencias (P)</b>	20
P1 Optimizaciones globales utilizando DFT en el descubrimiento de nuevos materiales, <b>Jonathan C. Luque-Ceballos</b> , Lauro Oliver Paz-Borbón, Ignacio L. Garzón-Sosa	21
P2 La entropía como parámetro en el diseño de aleaciones, <b>Miguel Armando Ávila-Rubio</b> , Daniel G. Ávila-Rubio, Francisco Javier Baldenebro-López	22



	Página
P3 Síntesis controlada de nanopartículas y su caracterización por microscopía electrónica, <b>Lourdes Soledad Bazán-Díaz</b>	23
P4 Materiales de construcción: impacto en la transferencia de calor en edificios y sus consecuencias ambientales, <b>Norma A. Rodríguez-Muñoz</b> , Ana Cecilia Borbón-Almada	24
P5 Quiralidad en nanopartículas metálicas con interfaz biomolecular, <b>Penélope Rodríguez-Zamora</b>	25
P6 Síntesis de TaC mediante el uso de diferentes fuentes de energía, <b>Yannely Carvajal-Campos</b> , Laura Guadalupe Ceballos-Mendívil, Carlos A. Pérez-Rábago, Claudio A. Estrada-Gasca	26
P7 Nanoaleaciones basadas en níquel para aplicaciones catalíticas, <b>Rubén Mendoza-Cruz</b>	27
P8 Efectos de la interacción de Van der Waals en cúmulos metálicos, <b>Analila Luna-Valenzuela</b> , Álvaro Posada-Amarillas	28
P9 Celdas solares sensibilizadas por colorantes, una alternativa para la generación eléctrica, <b>Tomás de J. Delgado Montiel</b> , Jesús Adrián Baldenebro-López	29
<b>Talleres (T)</b>	30
T1 Introducción al Machine Learning y sus aplicaciones en sistemas físicos, <b>Huziel Enoc Saucedá-Félix</b>	31





# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



## PRESENTACIÓN

La *Reunión Interinstitucional para la Divulgación de la Ciencia en Materiales* es un evento académico organizado por la Universidad Autónoma de Sinaloa (UAS) y la Universidad Nacional Autónoma de México (UNAM) con el fin de promover la divulgación de la ciencia en materiales para el beneficio del desarrollo académico y científico, acorde con la evolución global del acceso universal del conocimiento, mediante la vinculación de las investigaciones realizadas de manera interinstitucional. Además, se busca generar redes de investigación y colaboración académica con investigadores y grupos de investigación reconocidos a nivel nacional e internacional, mediante el intercambio de opiniones con grupos de trabajo entre las instituciones participantes.

Este año se realizó en modalidad híbrida la primera edición del evento, los días del 5, 6 y 7 de abril de 2022, en el auditorio de la Torre Académica de la Universidad Autónoma de Sinaloa, Unidad Regional Norte, reuniendo investigadores y estudiantes, cuyas experiencias científicas se presentaron mediante conferencias, ponencias y talleres.

Además de investigadores de la Facultad de Ingeniería Mochis (FIM) de la UAS, institución anfitriona y la UNAM, se tuvo la participación de prestigiosos investigadores de diversas instituciones invitadas tales como: The University of Texas at San Antonio (UTSA), University of California San Diego (UCSD), Northern Arizona University (NAU), Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV) y Universidad de Sonora (UNISON).

Con este evento se pretende reafirmar los lazos interinstitucionales fomentando el acceso universal del conocimiento, mediante actividades de divulgación de la ciencia de materiales.

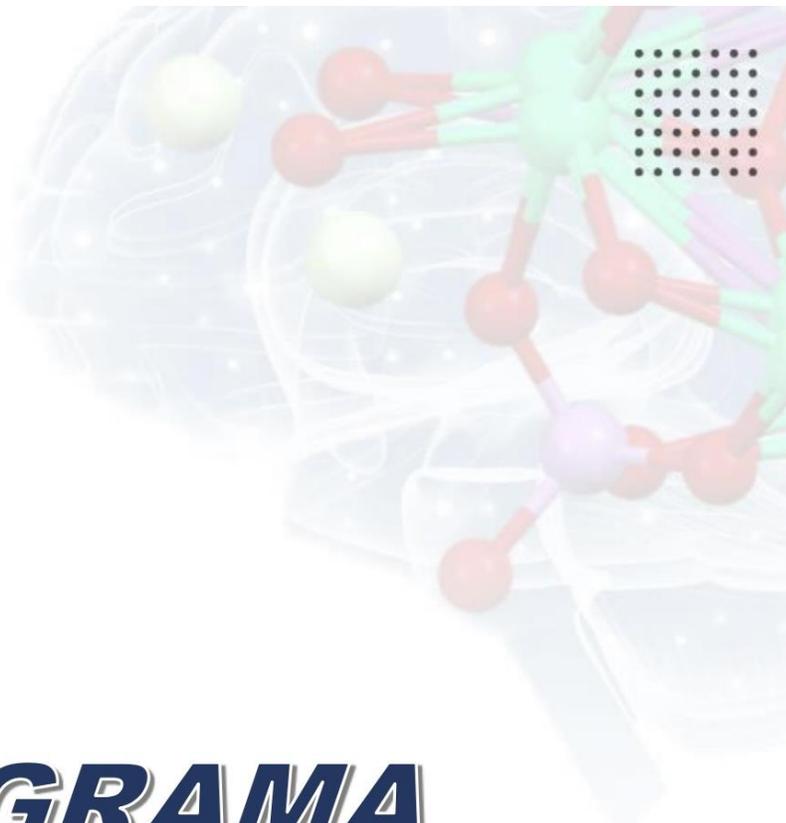
### INSTITUCIONES PARTICIPANTES



LOS MOCHIS, SINALOA, MÉXICO; 5 AL 7 DE ABRIL DE 2022.



# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



# ***PROGRAMA***

## INSTITUCIONES PARTICIPANTES



LOS MOCHIS, SINALOA, MÉXICO; 5 AL 7 DE ABRIL DE 2022.



# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



## PROGRAMA

Las actividades presenciales se desarrollaron en el Auditorio de Torre Académica de la Universidad Autónoma de Sinaloa, Unidad Regional Norte.

Las actividades virtuales se desarrollaron mediante la aplicación de videoconferencia Zoom.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES

### PROGRAMACIÓN

HORA	PONENTE	TEMA	INST.	MOD.
9:00-9:30	I N A U G U R A C I Ó N			
9:30-10:30	Dr. Ignacio Luis Garzón Sosa	Conferencia: "Quiralidad en la nanoescala".	UNAM	Presencial
10:45-11:45	Dra. Laura G. Ceballos Mendivil	Conferencia: "Aprovechamiento de la energía solar concentrada en la síntesis de cerámicos nanoestructurados".	UAS	Presencial
11:45-16:00	R E C E S O			
16:00-16:20	Dr. Jonathan C. Luque Ceballos	Ponencia: "Optimizaciones globales utilizando DFT en el descubrimiento de nuevos materiales".	UNAM	Presencial
16:20-16:40	Dr. Miguel Armando Ávila Rubio	Ponencia: "La entropía como parámetro en el diseño de aleaciones".	UAS	Presencial
16:40-17:00	Dra. Lourdes Soledad Bazán Díaz	Ponencia: "Síntesis controlada de nanopartículas y su caracterización por microscopía electrónica".	UNAM	Virtual
17:00-17:20	Dra. Norma A. Rodríguez Muñoz	Ponencia: "Materiales de construcción: impacto en la transferencia de calor en edificios y sus consecuencias ambientales".	CIMAV	Virtual
17:00-19:00	Dr. Huziel Enoc Saucedo Félix	Taller: "Introducción al Machine Learning y sus aplicaciones en sistemas físicos".	UNAM	Virtual

**Inscripción:**  
[bit.ly/3JEb6Wf](https://bit.ly/3JEb6Wf)

**Martes 5 de abril de 2022**

#### INSTITUCIONES PARTICIPANTES



LOS MOCHIS, SINALOA, MÉXICO; 5 AL 7 DE ABRIL DE 2022.



# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES

### PROGRAMACIÓN

HORA	PONENTE	TEMA	INST.	MOD.
9:00-10:00	Dr. Francisco J. Baldenebro López	Conferencia: "De la física-termodinámica a la física-mecánica en las aleaciones de alta entropía".	UAS	Presencial
12:15-13:15	Dr. Miguel José Yacamán	Conferencia: "Advanced electron microscopy as tool for discovery in materials physics".	NAU	Virtual
13:15-16:00	RECESO			
16:00-16:20	Dra. Penélope Rodríguez Zamora	Ponencia: "Quiralidad en nanopartículas metálicas con interfaz biomolecular"	UNAM	Virtual
16:20-16:40	Dra. Yannely Carvajal Campos	Ponencia: "Síntesis de TaC mediante el uso de diferentes fuentes de energía".	UADEO	Presencial
16:40-17:00	Dr. Rubén Mendoza Cruz	Ponencia: "Nanoaleaciones basadas en níquel para aplicaciones catalíticas".	UNAM	Virtual
17:00-17:20	Dra. Analía Luna Valenzuela	Ponencia: "Efectos de la interacción de Van der Waals en cúmulos metálicos".	UNISON	Presencial
17:20-17:40	Dr. Tomás de J. Delgado Montiel	Ponencia: "Celdas solares sensibilizadas por colorantes, una alternativa para la generación eléctrica".	UAS	Presencial
17:00-19:00	Dr. Huziel Enoc Saucedá Félix	Taller: "Introducción al Machine Learning y sus aplicaciones en sistemas físicos"	UNAM	Virtual

**Inscripción:**  
bit.ly/3JEb6Wf

**Miércoles 6 de abril de 2022**

#### INSTITUCIONES PARTICIPANTES



LOS MOCHIS, SINALOA, MÉXICO; 5 AL 7 DE ABRIL DE 2022.



# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES

### PROGRAMACIÓN

HORA	PONENTE	TEMA	INST.	MOD.
8:00-9:00	Dra. Olivia A. Graeve	Conferencia: "Materiales aeroespaciales para aplicaciones terrestres y extraterrestres".	UCSD	Virtual
9:00-10:00	Dr. Álvaro Posada Amarillas	Conferencia: "Materiales nanométricos: del universo virtual a la vida real".	UNISON	Virtual
10:00-11:00	Dr. José de Jesús Campos Gaxiola	Conferencia: "Desarrollo de sensores colorimétricos para la detección de iones metálicos mediante la funcionalización de nanopartículas de oro y plata".	UAS	Presencial
11:15-12:15	Dra. Xóchitl López Lozano	Conferencia: "Estudio de las propiedades de nanopartículas basadas en el I-Au60".	UTSA	Virtual
12:15-13:15	Dr. Carlos Javier Villagómez Ojeda	Conferencia: "Vacancy generation of copper surface by STM tunneling electrons due to the indigo-substrate interaction".	UNAM	Virtual
13:15-13:30	C L A U S U R A			

**Inscripción:**  
bit.ly/3JEb6Wf

Jueves 7 de abril de 2022

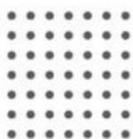
#### INSTITUCIONES PARTICIPANTES



LOS MOCHIS, SINALOA, MÉXICO; 5 AL 7 DE ABRIL DE 2022.



# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



# ***CONFERENCIAS***

## INSTITUCIONES PARTICIPANTES



LOS MOCHIS, SINALOA, MÉXICO; 5 AL 7 DE ABRIL DE 2022.



# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



## Quiralidad en la nanoescala

Ignacio Luis Garzón-Sosa  
Instituto de Física  
Universidad Nacional Autónoma de México  
garzon@fisica.unam.mx

### Resumen

En esta presentación se describe la importancia del desarrollo de la Ciencia de Materiales a nivel global y nacional. Para ello, se enfatiza la relevancia de la *Materials Genome Initiative* lanzada en Estados Unidos en 2011 por el presidente Obama. A nivel nacional, la permanencia por 30 años del *Materials Research Congress* es un ejemplo de la evolución y colaboración de los grupos de investigación mexicanos, que realizan investigación en Ciencia de Materiales. También se mencionan algunos indicadores a nivel latinoamericano de la clasificación de Universidades que realizan investigación en esta área de la ciencia.

Otro tema desarrollado es la Nanociencia, la cual es una de las varias fronteras en desarrollo de la Ciencia de Materiales. Para su estudio, utiliza metodologías experimentales y teórico-computacionales que se retroalimentan entre sí, para generar avances en el conocimiento fundamental de nanomateriales, dando lugar a aplicaciones potenciales en Nanotecnología.

Finalmente, se describe una de las propiedades de mayor interés actual en el estudio de los nanomateriales: quiralidad en la nanoescala. Se mencionan manifestaciones físicas y químicas de la quiralidad en nanomateriales y su estudio mediante técnicas teóricas y experimentales.

Los temas anteriores, que se pueden considerar como investigaciones en ciencia de frontera, se pueden desarrollar exitosamente si se logra la colaboración interinstitucional entre grupos de investigación nacionales y extranjeros.

#### INSTITUCIONES PARTICIPANTES



LOS MOCHIS, SINALOA, MÉXICO; 5 AL 7 DE ABRIL DE 2022.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Aprovechamiento de la energía solar concentrada en la síntesis de cerámicos nanoestructurados

Laura Guadalupe Ceballos-Mendivil

Facultad de Ingeniería Mochis  
Universidad Autónoma de Sinaloa  
laura.ceballos@uas.edu.mx

#### Resumen

La energía solar concentrada suministra procesos de calentamiento con una potencial fuente de energía para desarrollo de materiales, reduciendo emisiones de gas invernadero y otros contaminantes, por lo que los hornos solares son una herramienta muy beneficiosa, debido a su alcance de altas temperaturas en pocos segundos, siendo útil para el desarrollo de nuevas técnicas para mejorar las condiciones del control y homogeneidad de temperatura en reactores para el procesamiento de materiales, tales como metales, cerámicas, compósitos, entre otros.

Se presenta la síntesis de cerámicos nanoestructurados ( $\text{SiC}$ ,  $\text{TaC}$ ,  $\text{ZrB}_2$ ,  $\text{ZrO}_2$ ,  $\text{HfO}_2$ ) con el aprovechamiento de energía solar concentrada por medio del uso de tres reactores diseñados para hornos solares. En una primera etapa, se obtiene un complejo a baja temperatura, el cual es usado en una segunda etapa para obtener las cerámicas en el horno solar del IER-UNAM (HoSIER) a temperaturas entre  $1200\text{-}1500^\circ\text{C}$  por un tiempo de 25 a 60 minutos. Los materiales obtenidos fueron en polvo y se analizaron por diversas técnicas de caracterización: FTIR, TGA/DSC, DRX, TEM y SEM, confirmando la formación de nanoestructuras de cerámicas.

#### INSTITUCIONES PARTICIPANTES



LOS MOCHIS, SINALOA, MÉXICO; 5 AL 7 DE ABRIL DE 2022.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



De la física-termodinámica a la física-mecánica en las aleaciones de alta entropía

Francisco Javier Baldenebro López  
Facultad de Ingeniería Mochis  
Universidad Autónoma de Sinaloa  
francisco.baldenebro@uas.edu.mx

Resumen



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Advanced electron microscopy as tool for discovery in materials physics

Miguel José Yacamán  
Applied Physics and Materials Science Department  
Northern Arizona University  
Miguel.Yacaman@nau.edu

#### Resumen

In the last two decades Transmission Electron Microscopy (TEM) developments have produce a quantum leap on the study of materials. The development of spherical aberration correctors has pushed the resolution to the picometer range seeing of atoms routine. At the same time developments on the electron gun and of monochromators has pushed the to the atomic level the chemical analysis of samples. The development of highly efficient electron detectors has made possible the direct observation of soft materials possible. Finally, the advance in specimen holders allow in-situ and in operando measurements of materials. In the present talk we will discuss those TEM techniques and we will show some direct applications to the study of nanoalloys, nanoparticles and new carbon materials.

In nanoalloys the rules of the bulk are not follow. We will show results on the structure of multimetallic systems that indicate that the entropy and the surface ply a key role on stabilizing nanoalloys. In the case of carbon, we will report a newly found method to produce linear carbon chains in large amounts. Those chains are the strongest material which can be synthesised which a Young modulus of  $\sim 30$  TPa.



# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



## Materiales aeroespaciales para aplicaciones terrestres y extraterrestres

*Olivia A. Graeve*

Department of Mechanical and Aerospace Engineering  
University of California San Diego  
ograeve@eng.ucsd.edu

### Resumen

The idea of living on Mars or the Moon has been a staple of science fiction since the 19th century. The justification is that we need to go there if we want to create a backup location for humanity, in the event that life on Earth becomes untenable due to issues like climate change. We could also go there to search for additional resources such as water or precious metals. However, if this sci-fi dream were to ever become reality, what would it be like to actually live there? Conditions make living on Mars extremely challenging. In particular, materials needed for such extreme environments need to be discovered and designed. In this talk, we will present an overview and current research on carbide and boride materials for potential uses at extreme environments, including ultra-high and ultra-low temperatures, impact, and radiation. High-entropy carbides and hexaborides will be described in detail, especially in connection to their processing. A special focus on spark plasma sintering will be detailed, as the technique is optimum for quick processing of these types of materials.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Materiales nanométricos: Del universo virtual a la vida real

Álvaro Posada-Amarillas  
Departamento de Investigación en Física  
Universidad de Sonora  
posada@cifus.uson.mx

#### Resumen

Las aplicaciones tecnológicas de los nuevos materiales nanométricos requieren del conocimiento previo de sus propiedades, así como de su comportamiento ante fenómenos de interacción con el medio y con otros materiales. Estas interacciones pueden provocar cambios estructurales en los nanomateriales cuyo efecto se refleja de manera importante en sus propiedades, y por tanto, en su desempeño en aplicaciones tecnológicas, en áreas tales como nanomedicina, optoelectrónica, fotónica, y catálisis, entre muchas otras. En esta plática se presentarán algunos esquemas de cómputo usados en el estudio y caracterización teórica de nanomateriales, así como de las herramientas desarrolladas para ello. Particularmente, se presentarán resultados teóricos sobre cúmulos metálicos utilizando herramientas de cómputo.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Desarrollo de sensores colorimétricos para la detección de iones metálicos mediante la funcionalización de nanopartículas de oro y plata

José de Jesús Campos-Gaxiola  
Facultad de Ingeniería Mochis  
Universidad Autónoma de Sinaloa  
gaxiolajose@uas.edu.mx

#### Resumen

Los iones de metales pesados tienen un alto potencial biotóxico y ecotóxico y están presentes como contaminantes en el aire, los alimentos, el suelo y el agua, que representan una seria amenaza para los organismos expuestos a altos niveles de estos contaminantes.

Los métodos más empleados para detectar y cuantificar iones metálicos son: espectrometría de absorción atómica (AAS), plasma acoplado inductivamente mediante espectrometría de masas (ICP-MS), métodos electroquímicos y cromatografía líquida de alta resolución, sin embargo, estos métodos son costosos, de procedimientos largos, equipos grandes con altos consumos de energía, requieren operadores calificados y deben realizarse en un laboratorio bien equipado que son muy raros en países en desarrollo como México. Por lo que, es fundamental desarrollar métodos y técnicas instrumentales que sean de fácil acceso y operación de bajo costo para la rápida detección de metales pesados presentes en medio ambiente. Una alternativa es diseñar y emplear nanosensores colorimétricos debido a que estos poseen alta sensibilidad, lectura rápida y se pueden utilizar para pruebas in situ.

Nuestro grupo de investigación se ha enfocado en el diseño de nuevos nanosensores colorimétricos a partir de nanopartículas de oro (AuNp) y de plata (AgNp) funcionalizadas con el ácido 11-mercaptoundecilfosfónico y ácido 6-fosfohexanoico, respectivamente, para su aplicación en la detección y cuantificación de iones metálicos en medio acuoso.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Estudio de las propiedades de nanopartículas basadas en el I-Au<sub>60</sub>

Xóchitl López-Lozano  
Department of Physics and Astronomy  
The University of Texas at San Antonio  
Xochitl.Lopezlozano@utsa.edu

#### Resumen

La determinación de la estructura de nanopartículas (NPs) es crucial para el diseño de nuevos nanomateriales y aplicaciones. En esta plática presentaré los resultados del estudio teórico hecho sobre diferentes sistemas multipacas que contienen la NP chiral icosaédrica I-Au<sub>60</sub>. El principal objetivo es investigar si las propiedades excepcionales de ésta, como su peculiar rigidez, se conservan en otros sistemas que la contengan. Se presentarán resultados de las propiedades estructurales y electrónicas de sistemas de doble capa, a saber, I<sub>h</sub>-C<sub>60</sub>@I-Au<sub>60</sub>, I<sub>h</sub>-Au<sub>32</sub>@I-Au<sup>2+</sup><sub>60</sub>, Au<sub>60</sub>(MgCp)<sub>12</sub>, y sus análogos en Ag (plata). Los resultados obtenidos de la simulación computacional basada en la teoría de la funcional de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés) muestran que la estructura del I-Au<sub>60</sub> se conserva en todas las configuraciones tratadas. La simetría icosaédrica I no cambia y la NP I-Au<sub>60</sub> se deforma ligeramente sola para el caso del Sistema I<sub>h</sub>-C<sub>60</sub>@I-Au<sub>60</sub>. Se espera que los resultados de este trabajo motiven y guíen la futura síntesis de NPs basadas en I-Au<sub>60</sub>.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



Vacancy generation of copper surface by STM tunneling electrons due  
to the indigo-substrate interaction

Carlos Javier Villagómez-Ojeda  
Instituto de Física  
Universidad Nacional Autónoma de México  
cjvillagomez@fisica.unam.mx

Resumen



# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



# ***PONENCIAS***



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Optimizaciones globales utilizando DFT en el descubrimiento de nuevos materiales

Jonathan C. Luque-Ceballos<sup>1</sup>, Lauro Oliver Paz-Borbón<sup>1</sup>, Ignacio L. Garzón-Sosa<sup>1</sup>

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México  
jluque@fisica.unam.mx

### Resumen

En los últimos años los cúmulos metálicos han sido estudiados ampliamente debido a sus potenciales aplicaciones como fotocatalizadores, logrando proceso de vital importancia para la vida cotidiana como la generación de energía eléctrica e hidrógeno a partir de la descomposición del agua [1]. Recientemente se ha observado que las propiedades catalíticas pueden ser mejoradas al colocar un cúmulo metálico sobre una superficie semiconductor, logrando una mejor eficiencia. Específicamente las nanopartículas de AuPd sobre TiO<sub>2</sub> en su fase rutilo, han exhibido altas eficiencias [2 3].

Debido a que en la literatura no se encontraron estudios similares de AuPd soportado en TiO<sub>2</sub>, decidimos realizar un estudio para cúmulos de hasta 5 átomos de Au, Pd y todas las composiciones que surgen de la combinación de estos, lo anterior utilizando una aproximación Basin Hopping-DFT. Se utilizó la aproximación DFT+U utilizando un valor de  $U=3.0$  eV para los átomos de Ti. La superficie fue representada con 192 átomos, quedando 4x2 capas. Fueron incluidas las correcciones al dipolo. El pseudopotencial PBE fue implementado, el cual se encuentra disponible en el software Quantum Espresso. Se determinaron las energías de adsorción, densidad de estados y cargas de Bader para todos los tamaños y composiciones. A su vez, se analizaron los cambios estructurales de los cúmulos, observando el crecimiento 3D asociado a la transferencia de carga entre el cúmulo y el soporte.

#### Referencias:

- [1] I. Chakraborty, T. Pradeep, Chem. Rev., 2017, 117, 8208-8271
- [2] Xuning Li, et al., Adv. Mater., 2019, 31 (50), 1902031.
- [3] R. Su et al., ACS Nano, 2014, 8 (4), 3490-3497.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### La entropía como parámetro en el diseño de aleaciones

Miguel Armando Ávila-Rubio<sup>1</sup>, Guadalupe Daniel Ávila-Rubio<sup>1</sup>, Francisco Javier Baldenebro-López<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa  
miguel.avila.fim@uas.edu.mx

### Resumen

La entropía es una magnitud física que mide la energía utilizable y no aprovechable durante algún proceso y se define a partir del número de microestados permitidos para un constituyente, que da como resultado un macroestado de un sistema, siendo una función de probabilidad que nos dice que la posibilidad de encontrar un estado depende de la multiplicidad de combinaciones que dan como resultado dicho estado, terminando por ocurrir lo que es más probable que suceda. Al ser más fácil el “desorden” que el “orden”, existe mayor posibilidad de que se desordenen las cosas y de ahí que se defina vagamente a la entropía como la medición del desorden.

Las HEAs se definen como una novedosa clase de aleaciones con múltiples elementos, generalmente 5 o más, en proporciones equimolares o cercanas a ésta, que cristalizan en soluciones simples BCC y/o FCC, donde no existe un elemento principal.

A pesar de su química inusual, se ha encontrado que las soluciones sólidas formadas en las HEAs poseen mayor termoestabilidad que otras aleaciones, debido al grado de desorden molecular de mezcla, que conducen a una lenta difusión de átomos en las HEAs. Las propiedades específicas se derivan de cuatro efectos centrales: alta entropía, severa distorsión de red, difusión lenta y sinergia, los cuales dotan de atractivas propiedades a las HEAs, siendo candidatas para potenciales aplicaciones industriales.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Síntesis controlada de nanopartículas y su caracterización por microscopía electrónica

Lourdes Soledad Bazán Díaz

Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México

bazanlulu@materiales.unam.mx

### Resumen

En los últimos años, el estudio de la materia a nano-escala ha tenido un gran auge debido a que sus propiedades pueden diferir o ser mejoradas respecto a la contraparte macroscópica. Las nanopartículas presentan propiedades que dependen no solo de su tamaño, sino también de su forma, estructura y medio circundante. De igual forma, las propiedades pueden ser moldeadas al combinar dos o más elementos, mejorando la respuesta a cierto estímulo la cual dependerá del tipo de mezclado, su composición química y arreglo atómico. Uno de los métodos más comunes para producir diferentes nanopartículas es a través de la síntesis química en una disolución, la cual tiene la gran ventaja de producir nanoestructuras complejas y cuyas propiedades pueden ser cambiadas variando diferentes parámetros durante la reacción química. Sin embargo, para cualquier posible aplicación de las nanopartículas producidas, el conocimiento de su crecimiento, estructura, composición y correlación estructura-propiedad se hace de vital. En esta plática, se describe la versatilidad de la síntesis química “húmeda” para la producción de nanopartículas y su caracterización por microscopía electrónica de alta resolución y técnicas asociadas. Nanopartículas monometálicas y bimetálicas de diferentes elementos, pueden ser así producidas controlando su crecimiento, composición, estructura y forma final a través de la modificación de diferentes variables durante su crecimiento, nanopartículas que encuentran aplicabilidad de diferentes áreas tecnológicas.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Materiales de construcción: impacto en la transferencia de calor en edificios y sus consecuencias ambientales

Norma A. Rodríguez-Muñoz<sup>1</sup>, Ana C. Borbón-Almada<sup>2</sup>

<sup>1</sup> CONACYT, Centro de Investigación en Materiales Avanzados

<sup>2</sup> Depto. de Ingeniería Civil y Minas, Universidad de Sonora

norma.rodriguez@cimav.edu.mx

### Resumen

El requerimiento energético de edificaciones varía en relación de las propiedades térmicas y ópticas de los materiales que son utilizados para su construcción. Contar con materiales con propiedades idóneas ayudan a reducir fluctuaciones de temperaturas, así como pérdidas y ganancias de calor al interior del edificio. Se han evaluado propuestas de materiales con potencial uso en el ramo de la construcción con la intención de reducir la transferencia de calor en edificaciones, sometiendo materiales a pruebas de resistencia a compresión mecánica, calor específico y conductividad térmica, conforme a la normativa nacional, con la intención de tener materiales que permitan mayor confort térmico, uso racional de energía requerida para climatizarlas y una reducción en emisiones de CO<sub>2</sub>. En proyecto reciente se diseñó una serie de mezclas de concreto aligerado tomando en cuenta las propiedades termo físicas como conductividad térmica y calor específico, encontrando que el material propuesto es capaz de reducir entre 15 y 28% del requerimiento energético en viviendas; estas reducciones de consumo se mantienen al implementarse los escenarios de cambio climático del Panel Intergubernamental de Cambio Climático (IPCC) A1B y A2 proyectados hacia los años de 2030 y 2050 [1]. Se propuso un mortero de perlita de bajo costo para aplicación en fachadas de vivienda, el cual ayudó a reducir el consumo de energía hasta un 7.7% (calefacción) y 3.5% (enfriamiento), recuperando su inversión en menos de un año [2].

#### Referencias:

[1] Borbon-Almada et al. Design and Application of Cellular Concrete on a Mexican Residential Building and Its Influence on Energy Savings in Hot Climates: Projections to 2050. *Appl. Sci.* 2020, 10, 8225.

[2] Borbon-Almada et al. Energy and Economic Impact on the Application of Low-Cost Lightweight Materials in Economic Housing Located in Dry Climates. *Sustainability* 2019, 11, 1586.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Quiralidad en nanopartículas metálicas con interfaz biomolecular

Penélope Rodríguez Zamora

Instituto de Física, Universidad Nacional Autónoma de México

penelope.rz@fisica.unam.mx

#### Resumen

La actividad óptica que emerge de los sistemas híbridos conformados por un núcleo de nanopartícula metálica y una monocapa de biomoléculas quirales como ligando es una demostración de transferencia de quiralidad en la nanoescala. Con el fin de elucidar los mecanismos exactos de este fenómeno, realizamos estudios experimentales y teóricos de sus características quirópticas y vibracionales por medio de espectroscopía de dicroísmo circular y espectroscopía Raman. Aquí presentamos una caracterización de biomoléculas quirales tioladas adsorbidas en nanopartículas ultra-pequeñas de oro, plata y cobre, sintetizadas por hidrólisis asistida por microondas. Los resultados de dicroísmo circular revelan que existe una mezcla de estados electrónicos entre los átomos de los metales y el azufre de las moléculas, mientras que los resultados de espectroscopía Raman determinan la conformación del ligando en la superficie metálica. Combinados, aportan información clave para el entendimiento de la interface metal-tiol y de la transferencia de información quiral del ligando al núcleo metálico.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Síntesis de TaC mediante el uso de diferentes fuentes de energía

Yannely Carvajal-Campos<sup>1</sup>, Laura G. Ceballos-Mendivil<sup>2</sup>, Carlos A. Pérez-Rábago<sup>3</sup>, Claudio A. Estrada-Gasca<sup>3</sup>

<sup>1</sup> Depto. de Arquitectura, Diseño y Arte, Universidad Autónoma de Occidente

<sup>2</sup> Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa

<sup>3</sup> Instituto de Energías Renovables, Universidad Nacional Autónoma de México  
yannely.carvajalcampos@gmail.com

### Resumen

Los materiales metálicos, incluyendo las súper aleaciones, han superado su límite en las temperaturas de uso y para contrarrestar ésto es necesario el uso de materiales alternativos, como la cerámica. Las cerámicas se clasifican en tres grupos: tradicionales, refractarias y avanzadas o de ingeniería. Las cerámicas avanzadas generalmente poseen baja densidad, alta resistencia, alto módulo elástico, alta dureza, buena capacidad para altas temperaturas y excelente estabilidad química y ambiental. Los compuestos cerámicos de alto punto de fusión (superiores a 3000°C), como carburos, nitruros y boruros son la base de materiales avanzadas y son conocidos como cerámicas de ultra-alta temperatura (UHTC's). Dentro de las UHTC's, el carburo de tantalio (TaC) es un excelente candidato para uso en alta temperatura, debido a su alto punto de fusión (3800°C), alto módulo elástico (537 GPa), alta dureza (15-19 GPa), superioridad térmica, estabilidad química y buena selectividad espectral. En este trabajo se presenta la obtención de TaC por el método de reducción carbotérmica auxiliado por el proceso sol gel, usando fuentes de energía convencional y energía solar, analizando sus propiedades ópticas, morfología y estructura mediante diversas técnicas de caracterización.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Nanoaleaciones basadas en níquel para aplicaciones fotocatalíticas

Rubén Mendoza-Cruz

Instituto de Investigaciones en Materiales, Universidad Nacional Autónoma de México

rmendoza@materiales.unam.mx

### Resumen

Con el objetivo de incrementar la eficiencia y hacer un mejor uso de los recursos naturales, la investigación sobre el mejoramiento de las propiedades de los nanomateriales continúa. Creando aleaciones a la nanoescala mejora no solo las propiedades de las nanopartículas, sino también promueve la mejor eficiencia y aprovechamiento de recursos. El sistema de nanopartículas de aleaciones como el Ni-Pt ha sido de gran interés debido a su rendimiento en importantes reacciones catalíticas, incrementando la actividad y estabilidad de los nanocatalizadores a base de Pt. En nanoaleaciones, el cambio en tamaño, forma, composición relativa y ordenamiento atómico genera cambios en las propiedades, lo que puede ser explotado para dirigir una respuesta deseada. En esta plática se aborda la producción y el cambio morfológico a modo de nanopartículas de Ni-Pt, induciendo un crecimiento piramidal novedoso.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Efectos de la interacción de Van der Waals en cúmulos metálicos

Analila Luna-Valenzuela<sup>1</sup>, Álvaro Posada-Amarillas<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Depto. de Investigación en Física, Universidad de Sonora  
analilaluna25@gmail.com

#### Resumen

El conocimiento de las estructuras de mínima energía de los cúmulos de metales es crucial para comprender sus propiedades fisicoquímicas. En este trabajo, se investiga el efecto de las interacciones de van der Waals (vdW) en la estructura y estabilidad de los cúmulos de Cu-Pd. Se utiliza un algoritmo de búsqueda global que combina el método de salto de cuenca y la teoría del funcional de densidad para explorar la superficie de energía potencial de los cúmulos  $\text{Cu}_8\text{-xPd}_x$  ( $x=0,4,8$ ). Presentamos los motivos estructurales adoptados por los isómeros de baja energía obtenidos con el funcional de intercambio y correlación de gradiente generalizado PBE y con PBE complementado con correcciones de energía de dispersión dadas por el método D3 de Grimme. Las estructuras isoméricas obtenidas por los métodos PBE y PBE-D3 son bastante similares, excepto por cambios menores en algunos isómeros particulares. La energía de los cúmulos se investiga analizando la energía de enlace por átomo. Las energías de enlace son mayores cuando se incluyen las fuerzas vdW, y esta contribución aumenta de  $\text{Cu}_8$  a  $\text{Pd}_8$  y luego a  $\text{Cu}_4\text{Pd}_4$ . La mezcla entre átomos de Cu y Pd para formar nanoaleaciones es favorable, una característica consistente con la formación de compuestos intermetálicos en las aleaciones de Cu-Pd a granel. La brecha HOMO-LUMO indica que algunos isómeros en  $\text{Cu}_8$  y  $\text{Cu}_4\text{Pd}_4$  son más reactivos que el de menor energía, una característica que da la importancia que pueden tener los isómeros bajos en reacciones catalíticas. Las energías de enlace y brechas HOMO-LUMO presentan una mayor dependencia del funcional de correlación de intercambio que las estructuras de cúmulo.



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



Celdas solares sensibilizadas por colorantes, una alternativa para la generación eléctrica

Tomás de Jesús Delgado-Montiel<sup>1</sup>, Jesús Adrián Baldenebro-López<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Facultad de Ingeniería Mochis, Universidad Autónoma de Sinaloa

tomas.delgado@uas.edu.mx

### Resumen

Las celdas solares sensibilizadas por colorante son una alternativa a la generación eléctrica. Es por ello por lo que es necesario el estudio de sensibilizadores. En específico los sensibilizadores orgánicos tipo Donador-Puente- $\pi$ -Aceptor (D- $\pi$ -A) utilizados en celdas solares sensibilizadas por colorante (DSSC) han inducido una eficiencia de conversión de hasta el 14.8%. Estos han sido un componente clave para la modulación de la eficiencia de las DSSC, por lo tanto, es de gran interés el estudio teórico de sus propiedades ópticas y electrónicas.



# REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



## ***TALLERES***



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



Introducción al Machine Learning y sus aplicaciones en sistemas físicos

Huziel Enoc Saucedá-Félix  
Instituto de Física  
Universidad Nacional Autónoma de México  
huziel.sauceda@fisica.unam.mx

Resumen



## REUNIÓN INTERINSTITUCIONAL PARA LA DIVULGACIÓN DE LA CIENCIA EN MATERIALES



### Memorias de la Reunión Interinstitucional para la Divulgación de la Ciencia de Materiales

Fecha de compilación y edición: 25 de Abril de 2022.