



UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DEL ESTADO DE HIDALGO

INSTITUTO DE CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA

**DOCTORADO EN CIENCIAS DE LOS MATERIALES**

**TESIS DOCTORAL**

**PREDICCIÓN DE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y  
MECÁNICAS DE NANOALAMBRES PARA EL DISEÑO DE  
METAMATERIALES POR MEDIO DE PRIMEROS  
PRINCIPIOS.**

Para obtener el grado de:  
Doctor en Ciencias de los Materiales

**Presenta:**

M. en C. Miguel Arteaga Varela

**Director**

Dr. Ventura Rodríguez Lugo

**Codirectora**

Dra. Ariadna Sánchez Castillo

Mineral de la Reforma, Hgo., a Junio de 2025



**Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo**  
**Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería**  
*School of Engineering and Basic Sciences*

Mineral de la Reforma, Hgo., a 26 de junio de 2025

**Número de control:** ICBI-D/1132/2025  
**Asunto:** Autorización de impresión.

**MTRA. OJUKY DEL ROCIO ISLAS MALDONADO**  
**DIRECTORA DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR DE LA UAEH**

El Comité Tutorial de la tesis titulada **“PREDICCIÓN DE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y MECÁNICAS DE NANOALAMBRES PARA EL DISEÑO DE METAMATERIALES POR MEDIO DE PRIMEROS PRINCIPIOS”** realizado por el sustentante **Miguel Arteaga Varela** con número de cuenta **415851** perteneciente al programa del **Doctorado en Ciencias de los Materiales (tradicional)**, una vez que ha revisado, analizado y evaluado el documento recepcional de acuerdo a lo estipulado en el Artículo 110 del Reglamento de Estudios de Posgrado, tiene a bien extender la presente:

**AUTORIZACIÓN DE IMPRESIÓN**

Por lo que el sustentante deberá cumplir los requisitos del Reglamento de Estudios de Posgrado y con lo establecido en el proceso de grado vigente.

Atentamente  
 “Amor, Orden y Progreso”

El Comité Tutorial

  
 Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
 Director de tesis

  
 Dra. Ariadna Sánchez Castillo  
 Codirectora

  
 Dra. María Isabel Reyes Valderrama  
 Titular

  
 Dr. Alejandro de Jesús Herrera Carbajal  
 Suplente

  
 Mtro. Gabriel Vergara Rodríguez  
 Director del ICBI



GVR/IBO

Ciudad del Conocimiento, Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5 Colonia Carboneras, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México. C.P. 42184  
 Teléfono: 771 71 720 00 Ext. 40001  
 direccion\_icbi@uaeh.edu.mx, vergarar@uaeh.edu.mx

“Amor, Orden y Progreso”



2025



uaeh.edu.mx

# Agradecimientos

La culminación de esta tesis doctoral no habría sido posible sin el apoyo y la guía de muchas personas, a quienes deseo expresar mi más sincero agradecimiento.

En primer lugar, agradezco profundamente al Dr. Ventura Rodríguez Lugo, mi director de tesis, por su orientación constante, por su paciencia, por los retos que me planteó y por la confianza depositada en mi trabajo desde el inicio. Su experiencia y compromiso fueron esenciales para el desarrollo de esta investigación.

A la Dra. Ariadna Sánchez Castillo, mi codirectora, le agradezco sinceramente por sus observaciones oportunas, su acompañamiento académico y por ayudarme a enfocar esta investigación en la dirección correcta.

Extiendo mi gratitud a la Dra. María Isabel Reyes Valderrama, cuyo apoyo cotidiano fue clave para que este proceso fuera más llevadero y enriquecedor. También al Dr. Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, por su disposición, guía y valiosos comentarios durante el desarrollo de este trabajo.

En el ámbito personal, mi más profundo agradecimiento es para mi familia, especialmente para mi madre, por su amor incondicional, su apoyo en los momentos difíciles y por enseñarme con el ejemplo el valor del esfuerzo y la perseverancia. mi hermano, gracias por estar presente en cada etapa de este camino y por brindarme siempre palabras de aliento. A mis sobrinos, quienes con su alegría y cariño me dieron motivos para sonreír incluso en los días más exigentes, les agradezco por recordarme lo importante que es mantener viva la ilusión. A mis amigos más cercanos, gracias por su compañía, su escucha y por recordarme, una y otra vez, que hay vida más allá del laboratorio.

Finalmente, dedico este trabajo a quienes creen en la curiosidad como motor de descubrimiento y en la ciencia como una herramienta para imaginar y construir un mundo mejor.

## Resumen

En este estudio, se llevaron a cabo cálculos de primeros principios en sistemas cerámicos y metálicos. Para los sistemas cerámicos, se analizaron las propiedades estructurales y electrónicas de nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  con direcciones de crecimiento [100] y [110], utilizando tamaños de red 2x2, 3x3 y 4x4. Se observó que, para los sistemas 2x2 y 3x3, la brecha de energía disminuye a medida que aumenta el tamaño de la nanoestructura, reduciéndose aproximadamente en 0.15 eV. Sin embargo, al incrementar el tamaño a 4x4, la brecha energética presentó un aumento inesperado, lo que se atribuye a deformaciones en la red cristalina, principalmente en los enlaces Zr-O, afectando la conductividad eléctrica. Asimismo, se encontró que la dirección de crecimiento influye en la naturaleza de la brecha: para la dirección [100] la transición es indirecta, mientras que para la dirección [110] es directa. Los valores calculados de brecha de energía fueron 2.268 eV, 2.096 eV y 2.273 eV para las direcciones [100], y 1.624 eV, 1.059 eV y 1.779 eV para [110]. En cuanto a los sistemas metálicos, se determinaron que el módulo de Young y el coeficiente de Poisson para nanoalambres bimetálicos de Cd/Au, Cd/Ag y Zn/Cu en la dirección [111]. Los resultados indicaron que estos nanoalambres exhiben un comportamiento auxético, evidenciado por un coeficiente de Poisson negativo, lo que sugiere su potencial como candidatos para aplicaciones en metamateriales mecánicos, debido a su alta resistencia y propiedades mecánicas inusuales. Los valores obtenidos para el módulo de Young fueron 12.05 GPa para CdAu, 14.92 GPa para CdAg y 23.77 GPa para ZnCu. Los coeficientes de Poisson en las direcciones (xy) y (xz) fueron los siguientes: CdAg (-0.1648, -0.4181), CdAu (-0.1454, -0.4704) y ZnCu (-0.1893, -0.4267). Estos hallazgos fueron obtenidos utilizando el código Quantum ESPRESSO y programas realizados en python, demostrando la utilidad de estos sistemas en aplicaciones innovadoras dentro de la ingeniería de materiales.

## **Abstract**

In this study, first-principles calculations were conducted on ceramic and metallic systems. For ceramic systems, the structural and electronic properties of SrZrO<sub>3</sub> nanowires with [100] and [110] growth directions were analyzed using 2x2, 3x3, and 4x4 lattice sizes. It was observed that for the 2x2 and 3x3 systems, the energy gap decreased as the nanostructure size increased, reducing by approximately 0.15 eV. However, upon increasing the size to 4x4, the energy gap unexpectedly increased, which was attributed to deformations in the crystal lattice, primarily in the Zr-O bonds, affecting electrical conductivity. Additionally, the growth direction was found to influence the nature of the gap: the transition was indirect for the [100] direction and direct for the [110] direction. The calculated energy gap values were 2.268 eV, 2.096 eV, and 2.273 eV for the [100] direction, and 1.624 eV, 1.059 eV, and 1.779 eV for the [110] direction. For metallic systems, Young's modulus and Poisson's ratio were determined for bimetallic Cd/Au, Cd/Ag, and Zn/Cu nanowires in the [111] direction. The results indicated that these nanowires exhibit auxetic behavior, evidenced by a negative Poisson's ratio, suggesting their potential as candidates for mechanical metamaterial applications due to their high strength and unusual mechanical properties. The Young's modulus values obtained were 12.05 GPa for CdAu, 14.92 GPa for CdAg, and 23.77 GPa for ZnCu. The Poisson's ratios in the (xy) and (xz) directions were as follows: CdAg (-0.1648, -0.4181), CdAu (-0.1454, -0.4704), and ZnCu (-0.1893, -0.4267). These findings were obtained using the Quantum ESPRESSO code and Python-developed programs, demonstrating the utility of these systems for innovative applications in materials engineering.

## Índice

<b>Resumen</b> .....	4
<b>Abstract</b> .....	5
<b>Introducción</b> .....	10
<b>Capítulo I. Estado del Arte</b> .....	15
1.1.    Antecedentes .....	15
1.2.    Marco teórico .....	25
1.2.1.    Perovskitas .....	25
1.2.2.    Aleaciones metálicas .....	36
1.2.3.    Metamateriales .....	44
1.2.4.    Nanomateriales .....	54
1.2.5.    Propiedades de los metamateriales .....	60
1.2.6.    Principios de la química cuántica .....	64
1.2.7.    Teoría del Funcional de la Densidad (DFT por siglas en inglés) .....	66
1.2.8.    Pseudopotenciales .....	70
<b>Capítulo II. Metodología</b> .....	78
2.1.    Selección de Sistemas .....	78
2.2.    Herramientas Computacionales y Fundamentos de DFT .....	78
2.3.    Modelado de Nanoalambres de SrZrO <sub>3</sub> .....	79
2.3.1.    Construcción Estructural .....	79
2.3.2.    Optimización de Parámetros Clave .....	81
2.3.3.    Energía de Cohesión .....	83
2.3.4.    Cálculo de estructura de bandas y densidad de estados electrónicos .....	84
2.3.5.    Análisis y cálculo de módulo de Young en GPa .....	85
<b>Capítulo III. Análisis de Resultados</b> .....	89
3.1.    Nanoalambres de SrZrO <sub>3</sub> .....	89
3.1.1.    Propiedades estructurales de nanoalambres 2x2, 3x3 y 4x4 crecidos en las direcciones [100] y [110] .....	89
3.1.2.    Propiedades electrónicas de nanoalambres crecidos en la dirección [100] .....	93
3.1.3.    Estructura de bandas de nanoalambres crecidos en la dirección [110] .....	95
3.1.4.    Densidad de estados proyectada .....	97
3.2.    Nanoalambres bimetálicos de CdAg, CdAu y ZnCu crecidos en la dirección [111] .....	99
3.2.1.    Propiedades mecánicas de nanoalambres bimetálicos .....	100
3.2.2.    Módulo de Young nanoalambres bimetálicos .....	101

<b>Capítulo IV. Discusión de resultados</b> .....	112
4.1. Caso I. Nanoalambres de Zirconato de Estroncio.....	112
4.2. Caso II. Nanoalambres bimetálicos .....	114
<b>Referencias</b> .....	124
<b>Anexos</b> .....	147
A. Información complementaria.....	147
Materiales Sólidos Cristalinos.....	147
B. Optimización pseudopotencial BLYP .....	150
B1. Optimización pseudopotencial PBESOL PAW .....	154
C. Programa para cálculo de Modulo de Young.....	158
C1. Lectura y Preparación de Datos.....	158
C2. Ajuste Polinómico de los Datos .....	158
C3. Ajuste Polinómico de Datos.....	159
C4. Cálculo del Módulo de Young .....	159
C5. Visualización de Resultados.....	160
D. Cálculo del coeficiente de Poisson a partir del tensor de estrés.....	161
D1. Lectura del Tensor de Estrés .....	161
D2. Cálculo del Coeficiente de Poisson.....	162
D3. Implementación y Resultados .....	163
E. Productos.....	163
E1.1. Reportes técnicos .....	163
E1.2. Artículos.....	165
E1.3. Participaciones en Congresos nacionales e internacionales.....	166
A1.4. Reconocimientos, participación y organización de congresos .....	175

## Índice de Figuras

<i>Figura 1.1 Representación cristalográfica de un sólido <math>ABO_3</math>.</i> .....	27
<i>Figura 1.2 Metamateriales fotónicos.</i> .....	45
<i>Figura 1.3 Representación de sistemas con <math>\epsilon</math> y <math>\mu</math> con diferentes signos.</i> .....	46
<i>Figura 1.4 Refracción Negativa.</i> .....	48
<i>Figura 1.5 Sistemas 0D.</i> .....	56
<i>Figura 1.6 Sistemas 1D.</i> .....	58
<i>Figura 1.7 Sistemas 2D.</i> .....	60
<i>Figura 2.1 Gráfica del cálculo autoconsistente DFT.</i> .....	79
<i>Figura 2.2 Nanoalambres de <math>SrZrO_3</math> y aleaciones bimetálicas.</i> .....	80
<i>Figura 2.3 Primera Zona de Brillouin para nanoalambres.</i> .....	84

Figura 3.1 Secciones transversales de SrZrONWs con direcciones de crecimiento [100] y [110] utilizando diferentes unidades de formación: 2x2 (a y d), 3x3 (b y e) y 4x4 (c y f), respectivamente.	91
Figura 3.2 Energía de cohesión SrZrONWs con crecimiento en las direcciones [100] (a) y [110] (b).	92
Figura 3.3 Estructura de bandas para nanoalambres estequiométricos de SrZrO <sub>3</sub> con crecimiento [100] y unidades de formación 2x2 (a), 3x3 (b) y 4x4 (c), respectivamente. La energía de Fermi (línea roja) se muestra a 0 eV.	95
Figura 3.4 Estructura de bandas para nanoalambres estequiométricos de SrZrO <sub>3</sub> con crecimiento [110] y unidades de formación 2x2 (a), 3x3 (b) y 4x4 (c), respectivamente. La energía de Fermi (línea roja) se muestra a 0 eV.	97
Figura 3.5 Densidad de Estados Proyectados para nanoalambres SrZrO <sub>3</sub> crecidos en las direcciones [100] y [110] con unidades de formación 2x2 (a y d), 3x3 (b y e) y 4x4 (c y f).	99
Figura 3.6 Ajuste polinomial para cálculo de módulo de Young del nanoalambre CdAg.	102
Figura 3.7 Ajuste polinomial para cálculo de módulo de Young del nanoalambre CdAu.	104
Figura 3.8 Ajuste polinomial para cálculo de módulo de Young del nanoalambre ZnCu.	106
Figura 5.1 Estructuras cristalinas (Redes de Bravais)[16].	149
Figura 5.2 Optimización del Meshcutoff.	151
Figura 5.3 Ajuste red de puntos K.	152
Figura 5.4 Optimización geométrica (relajamiento del sistema).	154
Figura 5.5 Gráfica optimización Meshcutoff.	155
Figura 5.6 Ajuste red de puntos K.	156
Figura 5.7 Optimización geométrica del sistema en función de la energía.	157

## Índice de Tablas

Tabla 1.1 Propiedades Zirconato de estroncio Ortorrómbico, tetragonal y Cúbico.	32
Tabla 2.1 Datos Nanoalambres estequiométricos.	80
Tabla 2.2 Características de sistemas bimetálicos.	81
Tabla 2.3 Coordenadas primera Zona de Brillouin.	84
Tabla 3.1 Características Nanoalambres SrZrO <sub>3</sub> .	90
Tabla 3.2 Datos de optimización estructural de sistemas bimetálicos.	100
Tabla 4.1 Comparación efecto en la brecha energética en nanoalambres de perovskitas STO y SZO.	114
Tabla 4.2 Comparación del módulo de Young de los tres sistemas bimetálicos.	115
Tabla 4.3 Comparación de los coeficientes de Poisson.	119
Tabla 5.1 Ajuste del Meshcutoff para un pseudopotencial BLYP.	151
Tabla 5.2 Ajuste de puntos de k.	152
Tabla 5.3 Optimización geométrica con pseudopotencial BLYP.	153
Tabla 5.4 Optimización de la función de onda de prueba PBE (pbesol paw).	154
Tabla 5.5 Ajuste puntos de alta simetría.	155
Tabla 5.6 Optimización geométrica para un pseudopotencial PBE (pbesol paw).	157

## Índice de Ecuaciones

Ecuación 1.1 Límite de homogeneidad efectiva.	44
Ecuación 1.2 Medios de índice de refracción negativo.	47
Ecuación 1.3 Ley de Snell.	48
Ecuación 1.4 Ley de Snell con valor negativo de n <sub>2</sub> .	48
Ecuación 1.5 Coeficiente de Poisson.	50
Ecuación 1.6 Módulo de Young.	63

<i>Ecuación 1.7 Ecuación de Schödringer.</i>	64
<i>Ecuación 1.8 Hamiltoniano con base en interacciones electrostáticas.</i>	65
<i>Ecuación 1.9 Integral de la densidad electrónica igualada a número de electrones del sistema.</i>	66
<i>Ecuación 1.10 Ecuación de energía de Hohenberg y Kohn.</i>	67
<i>Ecuación 1.11 Hamiltoniano sin considerar interacciones entre núcleos.</i>	68
<i>Ecuación 1.12 Ecuación de Schödringer para configuración fija de núcleo.</i>	68
<i>Ecuación 1.13 Ecuación atómica de Schödringer para movimiento de núcleos.</i>	68
<i>Ecuación 1.14 Funcional de Densidad.</i>	69
<i>Ecuación 1.15 Potencial efectivo de Kohn-Sham.</i>	69
<i>Ecuación 1.16 Ecuación de Kohn-Sham.</i>	70
<i>Ecuación 1.17 Forma de pseudopotencial conservador de la norma.</i>	74
<i>Ecuación 1.18 Función de onda correspondiente a todos los electrones.</i>	74
<i>Ecuación 1.19 Forma pseudopotencial ultrasuave.</i>	75
<i>Ecuación 1.20 Ecuación general.</i>	75
<i>Ecuación 1.21 Definición del Operador <math>S^{\wedge}</math>.</i>	75
<i>Ecuación 1.22 Estados de pseudo referencia del radio de corte.</i>	75
<i>Ecuación 1.23 Forma general de un Pseudopotencial híbrido.</i>	76
<i>Ecuación 2.1 Energía de Cohesión.</i>	83

## Introducción

El avance actual en el desarrollo de materiales ha impulsado una exploración más profunda de sistemas complejos, los cuales presentan propiedades específicas que contribuyen significativamente al desarrollo de dispositivos y tecnologías orientadas a mejorar la calidad de vida. La evolución en los métodos de fabricación y caracterización de materiales ha permitido la creación de soluciones que no solo responden a las demandas industriales y tecnológicas, sino que también anticipan futuras aplicaciones, transformando sectores como la energía, la salud, las telecomunicaciones y la defensa. En este contexto, la investigación científica y tecnológica ha centrado sus esfuerzos en la síntesis de materiales con propiedades únicas que no se encuentran en los materiales naturales. Estos materiales, conocidos como metamateriales, se distinguen por sus características excepcionales y comportamientos que no existen en la naturaleza. Los metamateriales representan un avance en el campo de la ingeniería de materiales, dado que sus propiedades emergen a partir de la interacción de sus componentes estructurales, lo que les confiere ventajas significativas en aplicaciones donde los materiales convencionales no son adecuados[1].

Los metamateriales (MTM) son arreglos artificiales de elementos estructurales diseñados específicamente para obtener propiedades inusuales y ventajosas en comparación con los materiales disponibles en la actualidad. Estos materiales están formados por componentes que presentan una estructura homogénea artificial, otorgándoles características físicas distintivas que superan las limitaciones de cualquier material natural conocido hasta la fecha. En particular, sus propiedades han demostrado ser de gran relevancia en campos como el electromagnetismo (incluyendo la óptica), la acústica y la mecánica, ya que permiten modificar propiedades fundamentales como la refracción, la absorción de ondas o la respuesta mecánica[2]. Esta flexibilidad en la manipulación de sus propiedades ha hecho que los metamateriales se conviertan en un foco de atención para diversas industrias. El diseño y desarrollo de metamateriales requiere la integración de nanotecnología, simulación computacional y física del estado sólido. Debido a la complejidad inherente a sus estructuras, se emplean nanoestructuras de una y dos

dimensiones (1D y 2D) en su fabricación, y se aplican métodos de simulación avanzados para controlar con precisión el tamaño, la estructura y la forma de las partículas que los conforman. Esto es crucial para optimizar las propiedades deseadas de los metamateriales y maximizar su aplicabilidad en diversos campos tecnológicos[3]. La nanotecnología ha permitido avances significativos en la fabricación a escala atómica, lo que facilita la creación de metamateriales con propiedades a medida, difíciles de obtener mediante métodos convencionales.

El creciente interés en desarrollar nuevos sistemas con propiedades mejoradas ha sido impulsado por el aumento de la capacidad de procesamiento en chips computacionales de nueva generación. Esto ha permitido una mayor implementación de estudios teóricos orientados al descubrimiento y diseño de materiales con propiedades específicas, lo que ha llevado a la adopción de métodos computacionales para aproximar la interacción electrónica en átomos, iones, moléculas y sólidos. En este sentido, la teoría del funcional de la densidad (DFT) se ha consolidado como uno de los enfoques más utilizados para calcular las propiedades de los materiales[4,5]. Esta teoría proporciona un marco riguroso para determinar el estado fundamental de estructuras complejas mediante la minimización del funcional de la energía electrónica con respecto a la densidad electrónica[6]. La capacidad predictiva de estos métodos es esencial para el desarrollo de metamateriales, ya que muchas de sus propiedades son difíciles de experimentar directamente debido a la complejidad de sus estructuras.

El desarrollo de metamateriales enfrenta una serie de desafíos técnicos significativos, particularmente en lo que respecta a la predicción y optimización de sus propiedades para aplicaciones específicas. En este contexto, el uso de herramientas computacionales basadas en teorías físicas fundamentales y modelos avanzados se ha convertido en una alternativa viable para reducir la incertidumbre en el diseño de estos materiales. Estas herramientas permiten explorar sistemáticamente las relaciones entre la estructura, las propiedades electrónicas y el comportamiento mecánico de los materiales, lo que resulta crucial para su implementación en aplicaciones innovadoras. En el presente estudio, se investigan los avances en el campo de los metamateriales, con un enfoque particular en el

análisis detallado de las propiedades estructurales, electrónicas y mecánicas de sistemas unidimensionales (1D) basados en el zirconato de estroncio ( $\text{SrZrO}_3$ ). Este material, conocido por su estructura perovskita ortorrómbica en su forma de bulto, presenta una brecha de energía indirecta que oscila entre 3.1 eV y 3.6 eV, según estudios teóricos y experimentales previos. Esta característica lo posiciona como un semiconductor de banda ancha con aplicaciones potenciales en dispositivos optoelectrónicos y catalizadores. Además, el  $\text{SrZrO}_3$  exhibe una notable estabilidad térmica y propiedades dieléctricas, con una constante dieléctrica relativa que varía entre 20 y 30, lo que lo hace adecuado para su uso en capacitores y recubrimientos de alta temperatura. Sin embargo, cuando el material se reduce a nanoescala, como en el caso de nanoalambres, sus propiedades pueden verse significativamente alteradas debido a efectos de confinamiento cuántico y deformaciones en la red cristalina. Estudios recientes han reportado que la brecha de energía en nanoestructuras de  $\text{SrZrO}_3$  puede disminuir hasta en 0.5 eV en comparación con su contraparte en bulto, dependiendo de la orientación cristalográfica y el tamaño de la nanoestructura. Se aborda, además el estudio de nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  crecidos en las direcciones [100] y [110], utilizando configuraciones de unidades de formación de 2x2, 3x3 y 4x4, con el objetivo de establecer una correlación precisa entre la estructura cristalina y las propiedades electrónicas. Los resultados obtenidos se compararán con los reportados en la literatura, lo que permitirá evaluar el impacto de la dimensionalidad y la orientación cristalográfica en el comportamiento de este material, así como su potencial para aplicaciones avanzadas en ingeniería de materiales[7–10]. Adicionalmente, se analizan sistemas unidimensionales (1D) bimetálicos de CdAu, CdAg y ZnCu, crecidos en la dirección cristalográfica [111], con el objetivo de evaluar sus propiedades mecánicas, en particular el módulo de Young y el coeficiente de Poisson, con especial interés en identificar un comportamiento auxético (coeficiente de Poisson negativo). Este fenómeno, caracterizado por una expansión lateral bajo tensión, es de gran relevancia en el diseño de metamateriales avanzados, donde se buscan combinaciones únicas de resistencia, flexibilidad y capacidad de deformación. En su forma en bulto, estos sistemas presentan propiedades mecánicas

convencionales, con coeficientes de Poisson positivos y módulos de Young típicamente altos, como en el caso de ZnCu, que alcanza valores cercanos a 110 GPa. Sin embargo, en configuraciones nanométricas, su respuesta mecánica puede verse significativamente alterada debido a efectos de confinamiento cuántico, relajación estructural y cambios en la disposición atómica. Estudios previos han demostrado que la reducción de dimensionalidad y la orientación cristalográfica influyen notablemente en sus propiedades mecánicas, lo que resalta la importancia de caracterizar estos sistemas en configuraciones unidimensionales. Utilizando métodos computacionales avanzados basados en primeros principios, este estudio busca determinar el potencial de estos sistemas bimetálicos para aplicaciones en el diseño de metamateriales mecánicos, contribuyendo al desarrollo de tecnologías innovadoras en el campo de la ingeniería de materiales.

En el presente trabajo se realizó el estudio de nanoalambres cuyo objetivo es establecer un marco integral que sustente el diseño y aplicaciones innovadoras en el campo de metamateriales. El contenido de este trabajo se estructura de la siguiente manera:

- **Capítulo I:** Establece el estado del arte relativo a la estructura, composición, teoría empleada y conceptos básicos necesarios para la comprensión de la investigación.
- **Capítulo II:** Detalla la metodología utilizada para los cálculos de las propiedades de los sistemas en estudio, con un enfoque en la teoría computacional aplicada.
- **Capítulo III:** Presenta los resultados obtenidos y ofrece una evaluación de las propiedades estructurales, electrónicas y mecánicas de los metamateriales, incluyendo una discusión exhaustiva que destaca la novedad y relevancia de los hallazgos.

Finalmente, se exponen las conclusiones destacando los principales hallazgos y sus implicaciones en el desarrollo de metamateriales avanzados.

# **Capítulo I. Estado del Arte**

**Este capítulo presenta una revisión detallada de los enfoques y métodos utilizados en la investigación, incluyendo las herramientas computacionales, técnicas experimentales y los procedimientos seguidos en los análisis teóricos y simulaciones realizadas. Se discuten las bases fundamentales y los avances más relevantes que sustentan el desarrollo de la investigación y los resultados obtenidos.**

# Capítulo I. Estado del Arte

## 1.1. Antecedentes

En la década de 1970, el físico Víctor Veselago realizó un descubrimiento fundamental para la óptica y el electromagnetismo al determinar que la permitividad eléctrica (constante dieléctrica) y la permeabilidad magnética son parámetros esenciales en el estudio de la interacción de la radiación electromagnética con la materia. Estos parámetros, al afectar directamente el índice de refracción de un material, permiten una caracterización profunda del comportamiento óptico y electromagnético de diferentes medios. Veselago postuló tres escenarios teóricos según los signos de estas propiedades. En el primer caso, cuando ambos parámetros tienen signos positivos, la materia exhibe un comportamiento electromagnético común. En el segundo caso, propuso que, si un parámetro cambia a valores negativos, se desafiarían algunos principios fundamentales, sugiriendo que un material con tales características podría existir en condiciones naturales. En el tercer caso, el más intrigante, propuso que un material con valores negativos en ambas propiedades simultáneamente podría presentar un índice de refracción negativo, otorgándole propiedades radicalmente distintas de los materiales convencionales, lo cual despertó gran interés en el estudio de metamateriales[11]. A principios de los 2000, John B. Pendry y su equipo exploraron posibles estructuras capaces de manifestar un índice de refracción negativo. Mediante el diseño de metamateriales para frecuencias de microondas, Pendry propuso estructuras innovadoras que podrían producir un comportamiento óptico atípico. Una de las más destacadas es el "resonador de anillo dividido" (SRR), una estructura capaz de resonar bajo ciertos campos magnéticos, comportándose como un "átomo magnético" en el contexto de metamateriales. Este diseño se basa en circuitos de bucles o anillos conductores con espacios en su estructura, los cuales inducen resonancias específicas gracias a la combinación de inductancia y capacitancia generada[12].

El desarrollo de materiales complejos con propiedades diseñadas representa uno de los desafíos más avanzados en la ciencia y tecnología de materiales. Los metamateriales, con su capacidad para presentar propiedades electrónicas,

magnéticas y ópticas inusuales, abren caminos novedosos en múltiples aplicaciones. Un grupo de materiales con gran potencial en esta área son las perovskitas de tipo  $ABO_3$ , como el zirconato de estroncio ( $SrZrO_3$ ), que muestra propiedades estructurales y electrónicas prometedoras y aún no suficientemente estudiadas para aplicaciones en metamateriales.

Durante 2005 Evarestov y colaboradores realizaron estudios Ab initio para el sistema  $SrZrO_3$  empleando la teoría del funcional de la densidad en código CRYSTAL-03 mediante LCAO y ondas planas (PW) para posibles aplicaciones en celdas de combustible, sensores de gas de hidrógeno y electrólisis de vapor, empleando una malla de Monkhorst-Pack  $8 \times 8 \times 8$  para la perovskita en sus diferentes fases, cúbica, tetragonal y ortorrómbica, añadiendo un valor de función de onda de prueba de 600 eV, obteniendo buenos resultados entre su estudio teórico y lo reportado experimentalmente, teniendo valores para la perovskita cubica de  $4.196 \text{ \AA}$ , muy similar al reportado experimentalmente con un valor correspondiente de  $4.101 \text{ \AA}$ , obteniendo resultados para la fase tetragonal con dos parámetros cuyos valores son de  $5.935$  y  $8.393 \text{ \AA}$  comparándolos con los experimentales que corresponden a  $5.870$  y  $8.309 \text{ \AA}$ , a su vez reportando el valor de la energía de banda prohibida obtenido en su estudio correspondiente a valores de  $3.30$  eV para transición directa y  $3.37$  eV de transición indirecta, siendo valores aun lejanos de los reportados de forma experimental[13].

En 2015 Bandura y colaboradores realizaron cálculos periódicos de primeros principios basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT) empleando orbitales atómicos localizados (DFT-LCAO) y el potencial híbrido de intercambio-correlación PBE0 para obtener las propiedades estructurales y electrónicas de nanoalambres de  $SrTiO_3$  (STO) con dirección de crecimiento [001] de sistemas estequiométricos como no estequiométricos, donde realizaron variación en el diámetro de los nanoalambres desde  $0.3$  hasta  $2.4$  nm. Los cálculos muestran que la estabilidad energética aumenta con el diámetro y que la brecha de banda se reduce a medida que el diámetro aumenta, presentándose por debajo de la energía de Fermi, mostrándola como una brecha de energía diferente. Concluyendo este estudio en que los nanoalambres terminados en  $TiO_2$  son prometedores para

aplicaciones fotocatalíticas, debido a que el rango donde se ubican los niveles de potenciales de reducción de  $H^+/H_2$  y oxidación  $O_2/H_2O$  se encuentran en el rango de la brecha de energía prohibida para los sistemas 2x2, 3x3 y 4x4 con esta terminación, mientras que los terminados en SrO no son adecuados para dicho propósito[14].

En 2021, Md. Atikur Rahman y colaboradores llevaron a cabo un estudio exhaustivo de las propiedades estructurales, mecánicas, eléctricas, ópticas y térmicas de los compuestos  $AZrO_3$  (donde  $A = Mg, Ca, Sr, Ba, Sn, Cu$ ) mediante un enfoque ab-initio basado en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). Este estudio destaca la relevancia de estos materiales como alternativas libres de plomo para diversas aplicaciones tecnológicas, particularmente en el ámbito de las celdas solares. Para la investigación, se empleó el paquete computacional Cambridge Serial Total Energy Package (CASTEP) con el fin de realizar cálculos de optimización geométrica y caracterización de propiedades electrónicas, utilizando aproximaciones de Gradiente Generalizado (GGA) y el potencial de intercambio y correlación Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE) para optimizar la estructura de los compuestos. Los resultados obtenidos en las propiedades electrónicas de las perovskitas  $AZrO_3$  muestran que los compuestos  $MgZrO_3$ ,  $CaZrO_3$ ,  $SrZrO_3$ ,  $BaZrO_3$  y  $SnZrO_3$  presentan un carácter semiconductor, mientras que  $CuZrO_3$  exhibe un comportamiento metálico. Además, se detectó una alta absorción y conductividad en la región de energía ultravioleta (UV), lo que sugiere un gran potencial de estos materiales como absorbentes en dicha región. En cuanto a las propiedades mecánicas, los cálculos indicaron que los sistemas presentan un elevado módulo de Young y una notable dureza, lo que sugiere una alta resistencia a la deformación longitudinal, haciéndolos especialmente adecuados para aplicaciones industriales que requieren materiales con gran resistencia estructural[15].

Posteriormente en 2022 R. I. Eglitis y colaboradores realizaron un estudio teórico mediante cálculos ab initio detallados de superficies en perovskitas  $SrTiO_3$ ,  $BaTiO_3$ ,  $PbTiO_3$  y  $SrZrO_3$ . Utilizando aproximaciones híbridas de intercambio y correlación, como los funcionales B3PW y B3LYP, el estudio presenta un análisis minucioso de la relajación atómica y las energías superficiales para las superficies

(001) y (111). Los resultados muestran que en las superficies (001), los átomos de la capa superior tienden a relajarse hacia el interior, mientras que los átomos de la segunda capa se desplazan hacia afuera, lo cual es inverso a la tendencia observada en las superficies (111), donde todos los átomos metálicos en las dos capas superiores se relajan hacia el interior. Asimismo, se encontraron diferencias significativas en las energías superficiales: para las superficies (001), las terminaciones AO y BO<sub>2</sub> presentan energías similares, mientras que en las superficies (111), las terminaciones AO<sub>3</sub> y B difieren considerablemente en su energía superficial, siendo las de (111) notablemente más altas. Además, el estudio aborda la relevancia de los defectos puntuales, en particular las vacantes de oxígeno, las cuales influyen de manera notable en las propiedades electrónicas y estructurales de estas perovskitas. Los autores desarrollaron un modelo teórico que sistematiza las tendencias en la relajación atómica de las superficies (001) y (111), así como en los centros F, analizando también el incremento en la covalencia de los enlaces Ti–O y Zr–O en las proximidades de estas superficies. Estos hallazgos no solo proporcionan una comprensión más profunda de las propiedades superficiales de las perovskitas simples, sino que también resultan relevantes para el estudio de óxidos complejos de gran interés en aplicaciones tecnológicas avanzadas[16].

Posteriormente estudios realizados por Hussain y colaboradores (2024) emplearon cálculos de primeros principios basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT) mediante el código Wien2k, utilizando el potencial TB-mBJ acoplado con interacción spin-órbita (SOC), para investigar las propiedades electrónicas, magnéticas, ópticas y termoeléctricas de SrZrO<sub>3</sub> (SZO) dopado con Mn, Co y Fe en el sitio de Sr. Los cálculos se realizaron en una supercelda 2×2×2 con una concentración de dopaje del 12.5 %, empleando una malla de Monkhorst-Pack de 4×4×4 para la integración en el espacio recíproco y parámetros de radio muffin-tin (RMT) de 2.47, 0.02 y 0.02 Å para Sr, Zr y O, respectivamente. Los resultados mostraron que el SZO prístino presenta un comportamiento semiconductor no magnético con un gap de energía indirecto de 4.06 eV, mientras que el dopaje con Mn, Co y Fe redujo el gap a 1.38/1.74 eV (Mn-SZO), 2.98/0.0 eV (Co-SZO) y 0.0/1.87 eV (Fe-SZO), induciendo una naturaleza semiconductor

magnética o semi-metálica. Además, se calcularon momentos magnéticos totales de 2.99  $\mu\text{B}$ , 4.80  $\mu\text{B}$  y 4.11  $\mu\text{B}$  para los sistemas dopados, junto con energías de anisotropía magnética (MAE) de 1.27 meV, 1.45 meV y 0.67 meV, respectivamente, destacando su potencial en dispositivos espintrónicos. En propiedades termoeléctricas, el valor ZT máximo obtenido fue de 1.12 para Co-SZO a 170 K, superando estudios previos en materiales similares. Estos resultados teóricos, respaldados por análisis de estabilidad dinámica mediante espectros de fonones, sugieren que el SZO dopado es prometedor para aplicaciones en almacenamiento de energía, optoelectrónica y dispositivos magnéticos, aunque se requiere validación experimental para confirmar su viabilidad práctica[17].

En cuanto a materiales con propiedades mecánicas inusuales, el estudio de sistemas con coeficiente de Poisson negativo es desafiante pero prometedor. En 2016 Duc Tam Ho y colaboradores en su estudio Nanoalambres metálicos [100] con coeficiente de Poisson negativo, mostraron que los materiales a escala nanométrica unidimensionales pueden exhibir auxeticidad (propiedad de los materiales que se caracterizan por expandirse lateralmente al estirarse y contraerse al comprimirse) con diseños apropiados, y que la relación de Poisson de los nanoalambres puede ser efectivamente controlada por la razón de aspecto de la sección transversal. Para las secciones simétricas, el coeficiente de Poisson es positivo sin embargo a medida que la razón de aspecto aumenta, esta se vuelve negativa bajo cierta deformación. También encontraron que el relajamiento de la superficie genera tensiones asimétricas dentro de los nanoalambres lo cual es la principal causa del comportamiento auxético de los sistemas metálicos, mediante cálculos de dinámica molecular[18].

En el mismo año Dong Li y colaboradores desarrollaron una estructura celular cuadrilátera bidimensional compuesta por tiras bimetálicas con el propósito de analizar su comportamiento de deformación térmica y su impacto en la relación de Poisson. Para ello, se empleó un enfoque integral que combinó métodos experimentales, analíticos y simulaciones por elementos finitos en ANSYS, permitiendo validar los resultados obtenidos. Se determinó que la relación de Poisson de la estructura puede ajustarse de positiva a negativa mediante

variaciones de temperatura, alcanzando un valor absoluto máximo de aproximadamente 12 a una deformación de compresión de 0.001 y un cambio de temperatura de 10 °C. El análisis mostró que, para  $\Delta T$  positivo, la celda adopta una configuración convexa con un coeficiente de Poisson negativo, mientras que, para  $\Delta T$  negativo, la celda adquiere una geometría cóncava con un coeficiente de Poisson positivo. Además, se observó que el valor absoluto del coeficiente de Poisson decrece rápidamente en las primeras etapas de compresión y se estabiliza alrededor de 1 para  $\varepsilon_y > 0.1$ . Los valores absolutos máximos del coeficiente de Poisson, determinados a partir de simulaciones, oscilaron entre 11.98 y -11.87 dependiendo de  $\Delta T$ , mostrando una alta sensibilidad térmica en la respuesta mecánica de la estructura. La estrecha concordancia entre los resultados numéricos y las predicciones analíticas respalda la robustez del modelo propuesto, lo que sugiere un alto potencial de aplicación en el desarrollo de materiales inteligentes y estructuras adaptativas con capacidad de respuesta a estímulos térmicos, con posibles implicaciones en ingeniería civil, aeroespacial y dispositivos actuadores avanzados[19].

Posteriormente en 2018 Minghui Fu y colaboradores propusieron un nuevo diseño para materiales auxéticos tridimensionales basado en el mecanismo de rotación de panales quirales. Donde ellos estudiaron dos formas de redes desarrolladas a partir de panales tetrachirales con bucles circulares y cuadrados a su vez conectados por varillas inclinadas entre capas. Cuando realizaban un reemplazo en las capas de panal tetrachiral por otros tipos quirales, obtuvieron materiales con coeficiente de Poisson negativo. Las propiedades elásticas son casi independientes de la forma, la relación de Poisson fue verificada por simulaciones numéricas y experimentos de impresión 3D. Además, al cambiar la dirección de las varillas inclinadas, se puede obtener un nuevo material con relación de Poisson positiva en dos direcciones y negativa en otra, aplicando las mismas fórmulas[20].

En 2021, Jixiang Qi y colaboradores llevaron a cabo un estudio integral sobre los avances recientes en metamateriales mecánicos activos (AMMs) y sus principios de construcción, proporcionando una visión detallada de los llamados

"metamateriales mecánicos inteligentes". Estos AMMs representan una clase avanzada de materiales que integran las complejas configuraciones estructurales de los metamateriales mecánicos convencionales con el control activo de materiales sensibles a estímulos externos, logrando así propiedades notablemente superiores. La arquitectura de los AMMs incluye micro y macroestructuras diseñadas bajo principios específicos de construcción, tales como la transición de fase, el desajuste de deformación y la inestabilidad mecánica, que permiten controlar y modificar las respuestas materiales mediante estímulos físicos variados, como temperatura, campos magnéticos, luz, presión y corriente eléctrica. Este estudio revisa exhaustivamente las investigaciones pioneras y los desarrollos recientes en el campo de los AMMs, abordando tanto sus propiedades mecánicas mejoradas como sus aplicaciones prácticas en ingeniería, que abarcan funciones avanzadas de detección y activación ambiental. Una característica destacada de los AMMs es la combinación de múltiples materiales, donde los materiales elásticos proporcionan la estructura de soporte principal, mientras que los materiales activos sensibles a estímulos actúan como componentes de detección y activación. Esta configuración ha permitido el desarrollo de metamateriales altamente funcionales con múltiples variables controlables, abriendo un amplio rango de aplicaciones potenciales. Sin embargo, el estudio también señala desafíos críticos que deben ser resueltos para optimizar el desempeño de los AMMs, incluyendo el perfeccionamiento de las propiedades de los materiales activos y su diseño colaborativo con las estructuras elásticas de soporte. Los autores enfatizan que el avance de los AMMs también requiere la exploración de materiales alternativos y técnicas de fabricación innovadoras, especialmente considerando que estos materiales podrían incluir funciones físicas especiales adicionales, como propiedades ópticas, acústicas, electromagnéticas y biocompatibles. Los progresos en la ciencia computacional de materiales y las tecnologías de fabricación aditiva se perfilan como factores clave que acelerarán el desarrollo de los AMMs, asegurando su papel cada vez más relevante en una variedad de aplicaciones prácticas y en la mejora de la calidad de vida[21].

En 2022, Madhu Balan P y colaboradores llevaron a cabo un estudio sobre estructuras metamateriales auxéticos multifuncionales (AMMs), utilizando un enfoque de diseño estructural innovador para explorar sus propiedades mecánicas y multifuncionales en aplicaciones industriales diversas. Estos materiales presentan una capacidad de deformación peculiar que les confiere propiedades como la sinclástica, la memoria de forma, la resistencia a la indentación y la permeabilidad variable, las cuales les permiten adaptarse a diferentes estímulos. Las propiedades de los AMMs combinan las características de materiales convencionales con funciones adicionales, abriendo nuevas posibilidades para su uso en sectores como la automoción, la aviación, la confección, la medicina y la defensa. Sin embargo, a pesar de su prometedor potencial, la mayoría de sus aplicaciones aún se encuentran en fase teórica debido a las complejidades en su fabricación y a la falta de estabilidad estructural, lo que representa una oportunidad significativa para el desarrollo de soluciones prácticas. El avance en la fabricación de estos materiales ha sido clave para ampliar su aplicabilidad, especialmente al integrar propiedades auxéticas con funciones adicionales, siendo adoptado por diversas ramas de la ingeniería como la textil, aeroespacial y biomédica. En la industria aeroespacial, por ejemplo, los AMMs podrían reducir el peso de las estructuras sin comprometer su rendimiento, resultando en ahorros significativos de combustible. A pesar del creciente interés, la fabricación de tejidos auxéticos sigue siendo un desafío, ya que los hilos auxéticos aún no se han generalizado en la producción textil. En biomedicina, las aplicaciones de los AMMs se están destacando, especialmente en dispositivos como stents, dispositivos ortopédicos porosos y sensores biomédicos, gracias a su versatilidad, lo que ofrece soluciones más efectivas y adaptables en el cuidado de la salud. La investigación sobre AMMs continúa evolucionando, con un énfasis creciente en la integración de estructuras más complejas, como las teselaciones bidimensionales y las estructuras tridimensionales, lo que abre nuevas perspectivas para el diseño de materiales funcionales e innovadores. Sin embargo, los avances en el campo siguen enfrentando desafíos importantes, especialmente en la transición de la teoría a la práctica, particularmente en términos de la fabricación y la integración de estos materiales en aplicaciones a gran escala. El

desarrollo de nuevas geometrías auxéticas y la mejora de los procesos de producción son áreas clave para garantizar que los AMMs puedan ser utilizados de manera efectiva en aplicaciones industriales y médicas, prometiendo un impacto significativo en diversos sectores, desde la ingeniería estructural hasta la medicina[22].

En 2022 Bingcheng Luo y colaboradores proponen un novedoso metamaterial de grafeno a escala atómica mediante el cruce vertical de nanosheets de grafeno, que muestra una notable estabilidad energética, dinámica y mecánica según cálculos teóricos mediante DFT, en comparación con las bandas prohibidas nulas en el grafeno puro, el metamaterial de grafeno presentado exhibe una brecha de 107 meV, así mismo demostraron la presencia de módulos de Young anisotrópicos de más de 1 TPa a lo largo de la dirección [010] y 413 GPa a lo largo de la dirección [001]. El módulo de Young en el plano (1085 GPa) es superior al de los cerámicos técnicos de vanguardia como SiC (alrededor de 425 GPa), Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (alrededor de 400 GPa) y Si<sub>3</sub>N<sub>4</sub> (alrededor de 300 GPa), y el módulo de Young fuera del plano (413 GPa) se incrementa significativamente en comparación con el grafeno monocapa (alrededor de 2 GPa) esos resultados proporcionan una solución prometedora para el desarrollo de dispositivos fotónicos y optoelectrónicos modernos con respuestas ópticas de banda ancha y mejoradas[23].

En 2022, Eduard Farber y colaboradores realizaron una investigación sobre estructuras reticulares de aleación TiNi (nitinol) con el objetivo de obtener un bajo módulo de elasticidad y una relación de Poisson negativa. Los resultados clave mostraron una relación de Poisson de -0.00323 y un módulo de Young de 0.818 GPa, lo que evidencia propiedades mecánicas favorables. Para la fabricación de estas estructuras tridimensionales porosas, se empleó el método de fabricación aditiva Selective Laser Melting (SLM), el cual permite la creación de geometrías complejas a partir de polvo de aleación TiNi mediante la fusión selectiva del material con un láser. Este proceso facilita la obtención de estructuras con alta porosidad y propiedades mecánicas optimizadas. Se propone el uso de estos implantes avanzados como una solución para los problemas de inflamación ósea y despegue

del implante, ya que su diseño permite reducir la presión en el área de contacto entre el implante y el hueso, minimizando la inflamación y el riesgo de despegue, lo que mejora significativamente el rendimiento de los implantes médicos[24].

Continuando con los estudios de metamateriales mecánicos realizados por Zhang y colaboradores (2025) emplearon un enfoque multidisciplinario que combina experimentos de compresión cuasiestática, simulaciones por elementos finitos (FE) y modelos teóricos para investigar las propiedades mecánicas de un metamaterial bioinspirado en el esqueleto de esponjas de vidrio (*Euplectella aspergillum*). Utilizando el código ABAQUS, se modelaron estructuras reticulares simétricas con refuerzos diagonales dobles, variando el grosor relativo de las barras diagonales respecto a las cuadradas ( $Tr=Td/Ts$ ) en un rango de 0.4 a 1.1. Las simulaciones se validaron experimentalmente mediante ensayos de compresión uniaxial a 2 mm/min, empleando acero inoxidable 316L fabricado por fusión selectiva por láser (SLM). Los resultados revelaron tres patrones de deformación ajustables: **Modo P** ( $Tr=0.4$ ), con colapso progresivo y relación de Poisson cercana a cero (ZPR); **Modo U** ( $Tr=0.6-1.0$ ), con deformación uniforme y relación de Poisson negativa (NPR) debido a la rotación de uniones en "X"; y **Modo X** ( $Tr=1.1$ ), caracterizado por bandas de cizalla diagonales y relación de Poisson positiva (PPR). El análisis termomecánico demostró que la **competencia intrínseca** entre las barras diagonales y cuadradas determina la respuesta estructural, donde  $Tr$  modula la transición entre mecanismos de pandeo localizado y rotación global. Los modelos teóricos, basados en el método de Castigliano y la teoría de superplegamiento simplificado (SSFE), identificaron parámetros óptimos: ángulo diagonal  $\theta \approx 35^\circ$  y  $Tr = 0.6-1.0$ , maximizando la rigidez elástica ( $E^*$ ) y la resistencia plástica ( $\sigma m^*$ ). La **absorción específica de energía (SEA)** alcanzó 21.6 J/g ( $Tr=1.0$ ), superando en un 282% a estructuras re-entrantes y en un 193% a panales de abeja metálicos. Comparado con diseños previos asimétricos (BLS-Cent), el metamaterial simétrico (BLS-Axi) mostró una deformación más uniforme y estable, con NPR continuo (-0.42) y capacidad de programación in situ mediante patrones pixelados de refuerzo diagonal. Sin embargo, se identificaron limitaciones en la reproducibilidad de bandas de cizalla debido a defectos de fabricación (porosidad en SLM) y la

ausencia de validación 3D a escala real. Los estudios extendidos a estructuras tubulares 3D sugirieron comportamientos similares, destacando aplicaciones potenciales en sistemas de absorción de impacto y robótica adaptable. Aunque el trabajo establece bases para el diseño de metamateriales programables, se requiere validación experimental a largo plazo y la integración de tecnologías como impresión multimaterial para optimizar la respuesta multifuncional[25].

## **1.2. Marco teórico**

La investigación de sistemas estructurales avanzados y metamateriales se centra en materiales como la perovskita de zirconato de estroncio ( $\text{SrZrO}_3$ ), cuya estructura cristalina y propiedades ferroeléctricas sustentan aplicaciones en optoelectrónica y sensores. Las aleaciones bimetálicas ( $\text{Cd-Au}$ ,  $\text{Cd-Ag}$ ,  $\text{Ni-Ti}$ , etc.) se estudian por su sinergia de fases, que genera efectos de memoria de forma y superelasticidad haciéndolos candidatos idóneos para el desarrollo de metamateriales mecánicos. A escala nanométrica, los nanomateriales explotan efectos cuánticos para optimizar propiedades mecánicas, mientras los metamateriales, diseñados con topologías artificiales, manipulan ondas electromagnéticas o acústicas, desafiando límites físicos convencionales. Mediante mecánica cuántica y DFT, se modelan interacciones atómicas y se correlacionan modificaciones estructurales (dopaje, patrones) con funcionalidades emergentes, estableciendo un marco teórico-práctico para el diseño racional de materiales innovadores en sectores estratégicos.

Comenzando con los materiales centrales de esta investigación la perovskita de zirconato de estroncio ( $\text{SrZrO}_3$ ) y aleaciones bimetálicas orientadas al desarrollo de metamateriales, se explora cómo su configuración estructural influye directamente en sus propiedades físicas, permitiendo así identificar relaciones clave entre la arquitectura atómica y el comportamiento funcional del material.

### **1.2.1. Perovskitas**

Los sistemas de perovskitas han surgido como una clase de materiales de interés considerable en la investigación de materiales debido a sus propiedades multifacéticas, que son adecuadas para una amplia gama de aplicaciones

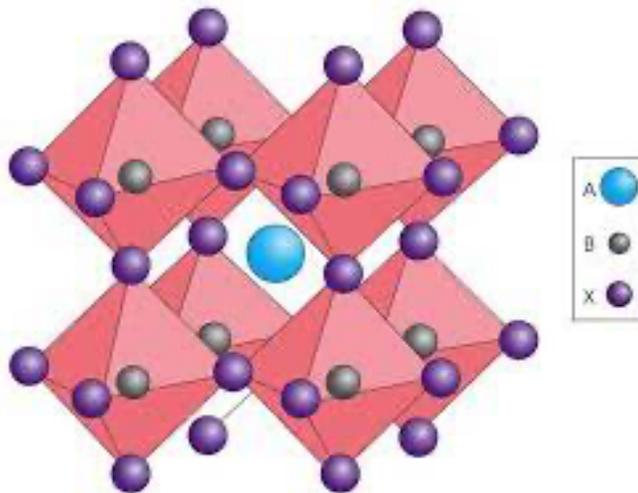
tecnológicas. Su estructura cristalina versátil permite la ingeniería de propiedades electrónicas y ópticas que los hacen particularmente atractivos para dispositivos electrónicos, optoelectrónicos y de conversión de energía. Las perovskitas, que deben su nombre al mineral perovskita ( $\text{CaTiO}_3$ ), adoptan una estructura cristalina genérica  $\text{ABX}_3$ , donde 'A' y 'B' son cationes de diferentes tamaños, y 'X' es un anión, típicamente un haluro. Esta flexibilidad composicional permite el ajuste preciso de sus propiedades mediante la sustitución de iones en las posiciones 'A', 'B' o 'X'[26–28].

#### 1.2.1.1. Estructura Cristalina de las Perovskitas.

La estructura cristalina de las perovskitas es fundamental para sus propiedades y aplicaciones, es por ello que entender la disposición atómica en los cristales de perovskitas abre una ruta de interés en las investigaciones científico-tecnológicas. La fórmula determinada por su estructura cristalina es  $\text{ABX}_3$ , el ion 'A' ocupa los vértices del cubo, el ion 'B' se sitúa en el centro del cubo, y el anión 'X' se encuentra en los centros de las aristas. Esta estructura puede distorsionarse en respuesta a varios factores, como el tamaño relativo de los iones y las condiciones de síntesis, lo que da lugar a diversas fases y propiedades físicas. La estabilidad y las propiedades de las perovskitas están estrechamente relacionadas con la tolerancia del factor de Goldschmidt, que es una medida de la compatibilidad de los tamaños iónicos en la estructura[29–35].

- **Ion A:** Generalmente, un catión más grande como cesio ( $\text{Cs}^+$ ), metilamonio ( $\text{MA}^+$ ) o formamidinio ( $\text{FA}^+$ ), que influye en la estabilidad térmica y la polaridad del material.
- **Ion B:** Un catión más pequeño y de carga alta como plomo ( $\text{Pb}^{2+}$ ), estaño ( $\text{Sn}^{2+}$ ) o germanio ( $\text{Ge}^{2+}$ ), que juega un papel crucial en las propiedades electrónicas y la banda prohibida del material.
- **Ion X:** Un anión haluro como cloro ( $\text{Cl}^-$ ), bromo ( $\text{Br}^-$ ) o yodo ( $\text{I}^-$ ), que afecta la estructura cristalina y las propiedades ópticas.

La correlación cerrada entre sus propiedades químicas y físicas facilitan el cambio estructural con la modificación de variables físicas como presión y temperatura, en la Figura 1.1 se observa una estructura cúbica tipo perovskita[36].



*Figura 1.1 Representación cristalográfica de un sólido  $ABO_3$ .*

### 1.2.1.2. **Propiedades y Aplicaciones de las Perovskitas.**

Las perovskitas han emergido como un grupo destacado de materiales debido a sus propiedades excepcionales, que abarcan un amplio espectro de características electrónicas, ópticas y físicas, las cuales son altamente aprovechables en diversas aplicaciones tecnológicas contemporáneas. Estas propiedades permiten a las perovskitas desempeñar un papel crucial en la evolución de dispositivos en campos como la energía, la electrónica y la fotónica.

1. **Propiedades Optoelectrónicas:** Una de las características más sobresalientes de las perovskitas es su capacidad para exhibir una absorción de luz intensa, combinada con una alta movilidad de portadores de carga. Esta combinación es fundamental para su uso en aplicaciones como celdas solares, LEDs y fotodetectores. La alta eficiencia de conversión de energía observada en las celdas solares de perovskita se debe a su estructura de banda prohibida directa, que favorece la absorción de fotones y la generación de pares de electrones y huecos. Además, la alta probabilidad de recombinación radiactiva permite una eficiente emisión de luz en los LEDs, lo que mejora su rendimiento y funcionalidad. Esta versatilidad en las propiedades ópticas y electrónicas las hace ideales para tecnologías de energía renovable y dispositivos de iluminación avanzada[37–41].
2. **Propiedades Ferroeléctricas y Piezoelectricas:** Algunas perovskitas, como el  $BaTiO_3$ , presentan propiedades ferroeléctricas y piezoelectricas

notables que amplían sus aplicaciones en el ámbito de la electrónica. Estas propiedades emergen de la capacidad del material para polarizarse bajo un campo eléctrico, lo que es crítico en la fabricación de memorias no volátiles, actuadores y sensores. En particular, las propiedades piezoeléctricas permiten que estas perovskitas conviertan estímulos mecánicos en señales eléctricas, haciéndolas útiles en dispositivos microelectromecánicos (MEMS), donde la miniaturización y la sensibilidad son fundamentales[42–45].

- 3. Propiedades Térmicas y de Estabilidad:** La estabilidad térmica y química de las perovskitas es esencial para su implementación efectiva en dispositivos a largo plazo. Actualmente, gran parte de la investigación se centra en mejorar la estabilidad de las perovskitas híbridas orgánico-inorgánicas, que son especialmente susceptibles a la degradación provocada por la humedad, el oxígeno y la luz UV. Para superar estos desafíos, se están explorando diversas estrategias, como la pasivación de superficies y el diseño de capas protectoras, que tienen como objetivo prolongar la vida útil y el rendimiento de estos materiales en entornos operativos reales[46–49].

Dentro de las aplicaciones más relevantes de las perovskitas se encuentran su implementación en celdas solares de perovskita, que han demostrado alcanzar eficiencias superiores al 25% en un corto período. Este avance ha revitalizado el interés en la energía solar, prometiendo tecnologías más accesibles y eficientes que podrían desempeñar un papel clave en la transición hacia fuentes de energía más sostenibles. En resumen, el estudio de las perovskitas no solo es crucial para la comprensión de sus propiedades fundamentales, sino que también es fundamental para el desarrollo de nuevas tecnologías que tienen el potencial de transformar industrias enteras[50–55].

#### **1.2.1.3. Celdas Solares de Perovskitas.**

Esta tecnología ha surgido como de forma emergente en el campo de la energía solar, destacándose por su notable progreso en términos de eficiencia de conversión de energía y costo de fabricación. Desde su introducción en el ámbito de la investigación fotovoltaica, estas celdas han demostrado un aumento acelerado

en su eficiencia, alcanzando valores competitivos con las tecnologías de silicio tradicionales, que han dominado el mercado durante décadas. Esta evolución rápida se debe a varias características intrínsecas de las perovskitas, tales como su alta absorción de luz, la capacidad de generar pares de electrones-huecos, y su fácil procesamiento en soluciones, lo que permite la producción de capas delgadas a bajo costo.

La flexibilidad de las celdas solares de perovskitas también es un factor clave que contribuye a su atractivo. A diferencia de las celdas de silicio, que son frágiles y requieren sustratos rígidos, las celdas de perovskita pueden ser depositadas sobre sustratos flexibles, lo que abre la puerta a nuevas aplicaciones en dispositivos portátiles y ropa inteligente. Además, el uso de materiales abundantes y menos tóxicos en las perovskitas ofrece una vía hacia la sostenibilidad y la reducción de costos en la fabricación.

A pesar de su prometedor rendimiento, la tecnología de celdas solares de perovskitas enfrenta varios desafíos que deben ser abordados para su comercialización a gran escala. Entre ellos se encuentran la estabilidad a largo plazo y la resistencia a factores ambientales como la humedad y la luz UV, que pueden comprometer su rendimiento. En este contexto, la investigación actual se centra en la optimización de la composición de los materiales y el desarrollo de estrategias de encapsulación efectivas para mejorar la durabilidad de estos dispositivos[56–63].

#### **i. Ventajas:**

1. **Alta eficiencia de conversión de energía:** Las perovskitas poseen un coeficiente de absorción de luz muy alto, permitiendo la absorción efectiva de luz solar incluso en capas delgadas. Esta característica, junto con la banda prohibida ajustable, facilita la optimización del espectro de absorción para maximizar la eficiencia de conversión.
2. **Bajo costo de fabricación:** La fabricación de celdas solares de perovskitas es compatible con técnicas de procesamiento a baja temperatura y deposición por solución, lo que reduce los costos en comparación con los

procesos de alta temperatura requeridos para el silicio cristalino. Además, los materiales precursores son generalmente más económicos y abundantes.

3. **Flexibilidad y Ligereza:** Las perovskitas pueden ser depositadas sobre sustratos flexibles, lo que permite la fabricación de dispositivos fotovoltaicos ligeros y portátiles. Esta característica abre nuevas oportunidades para aplicaciones en dispositivos electrónicos flexibles y vestibles.

#### ii. **Desafíos:**

1. **Estabilidad a Largo Plazo:** Las perovskitas híbridas orgánico-inorgánicas muestran una susceptibilidad a la degradación bajo condiciones ambientales, lo que limita su durabilidad. La investigación se centra en mejorar la estabilidad mediante la encapsulación de dispositivos y el desarrollo de materiales más robustos.
2. **Toxicidad del Plomo:** La presencia de plomo en las perovskitas plantea preocupaciones ambientales y de salud. Se están investigando alternativas de perovskitas libres de plomo, como las basadas en estaño y germanio, aunque estas aún enfrentan desafíos en términos de eficiencia y estabilidad.

Entre las diversas estructuras cristalinas que componen la familia de las perovskitas, el zirconato de estroncio ( $\text{SrZrO}_3$ ) emerge como un material de particular interés debido a sus excelentes propiedades físicas y químicas. Aunque aún no ha sido objeto de un estudio exhaustivo en comparación con otras perovskitas más comunes, como el titanio de bario ( $\text{BaTiO}_3$ ) o el plomo de estaño ( $\text{MAPbI}_3$ ), el zirconato de estroncio presenta características que lo posicionan como un candidato prometedor para diversas aplicaciones tecnológicas.

El zirconato de estroncio exhibe notables propiedades ferroeléctricas, piezoeléctricas y de conductividad iónica, lo que sugiere su potencial uso en dispositivos electrolumínicos, sensores y actuadores. Estas propiedades se derivan de su estructura cristalina altamente simétrica y de la capacidad de polarización inducida por un campo eléctrico, que permite una respuesta rápida y eficiente en aplicaciones que requieren un control preciso. Además, su estabilidad térmica y resistencia a la corrosión lo convierten en un material adecuado para entornos

extremos, ampliando aún más su viabilidad en aplicaciones industriales y de alta tecnología.

#### **1.2.1.4. Perovskita de zirconato de estroncio**

El zirconato de estroncio ( $\text{SrZrO}_3$ ) pertenece a la familia de las perovskitas con la fórmula general  $\text{ABO}_3$ [64]. Este material exhibe propiedades destacadas, como un alta constante dieléctrica de 21[65], lo que indica su capacidad para almacenar carga eléctrica bajo un campo eléctrico externo. Además, posee un módulo de Young de 174 GPa en su fase ortorrómbica, 165 GPa en la fase tetragonal y 160 GPa en la fase cúbica, junto con una tenacidad a la fractura de hasta  $1.5 \text{ MPa}\cdot\text{m}^{1/2}$ , lo que sugiere una resistencia mecánica moderada. Su estabilidad térmica alcanza los  $2500 \text{ }^\circ\text{C}$  en la fase ortorrómbica,  $2400 \text{ }^\circ\text{C}$  en la tetragonal y  $2300 \text{ }^\circ\text{C}$  en la cúbica, lo que lo hace adecuado para aplicaciones en entornos de alta temperatura[66]. Estas características hacen que el  $\text{SrZrO}_3$  sea prometedor para diversas aplicaciones, incluyendo materiales ópticos para celdas solares y fotocatalisis. En cuanto a su estructura cristalina, el zirconato de estroncio experimenta transiciones trifásicas a temperaturas específicas: ortorrómbico ( $\text{Pnma}$ ) a 970 K, ortorrómbico ( $\text{Cmcm}$ ) a 1100 K, tetragonal ( $\text{I4/mcm}$ ) a 1440 K, y finalmente cúbico ( $\text{Pm3m}$ ) como la fase más estable. Electrónicamente, se comporta como un dieléctrico con una energía de banda prohibida de 5.6 eV en su fase ortorrómbica, 5.4 eV en la tetragonal y 5.5 eV en la cúbica[67–69].

En la Tabla 1.1 se presentan diversas propiedades de las fases ortorrómbica, tetragonal y cúbica del  $\text{SrZrO}_3$ , destacando su relevancia en materiales avanzados. Su estructura cristalina está caracterizada por una constante de red de  $a = 5.83$ ,  $b = 8.24$ ,  $c = 5.76 \text{ \AA}$  en la fase ortorrómbica,  $a = 5.85$ ,  $c = 8.30 \text{ \AA}$  en la fase tetragonal y  $a = 4.1 - 4.2 \text{ \AA}$  en la fase cúbica, junto con un peso molecular de  $226.84 \text{ g/mol}$ . Su densidad varía entre  $5.50$  y  $5.52 \text{ g/cm}^3$ , lo que sugiere una estructura compacta. Ópticamente, el  $\text{SrZrO}_3$  exhibe un índice de refracción de aproximadamente 2.1 en la fase ortorrómbica, 2.05 en la tetragonal y 2.0 en la cúbica, con una absorción óptica en el rango de 220-340 nm, lo que le confiere potencial en aplicaciones fotónicas y optoelectrónicas. Además, su comportamiento diamagnético lo hace útil en aplicaciones electrónicas donde se requiere baja susceptibilidad magnética.

La solubilidad despreciable del SrZrO<sub>3</sub> en soluciones acuosas indica una alta estabilidad ambiental, lo que, combinado con su resistencia mecánica y térmica, sugiere aplicaciones en dispositivos electrónicos, recubrimientos protectores y celdas de combustible.

*Tabla 1.1 Propiedades Zirconato de estroncio Ortorrómbico, tetragonal y Cúbico.*

<b>Propiedades del Zirconato de estroncio (SrZrO<sub>3</sub>)</b>			
<b>Propiedad</b>	<b>Fase Ortorrómbica (Pnma)</b>	<b>Fase Cúbica (Pm3m)</b>	<b>Fase Tetragonal (I4/mcm)</b>
<b>Constante de red (Å)</b>	a= 5.83, b= 8.24, c= 5.76	a= 4.1-4.2	a= 5.85, c=8.30
<b>Peso Molecular</b>	226.84 g/mol		
<b>Densidad (g/cm<sup>3</sup>)</b>	5.52	5.50	5.51
<b>Band Gap (eV)</b>	5.6	5.5	5.4
<b>Módulo de Young (GPa)</b>	174	160	165
<b>Tenacidad a la fractura (MPa·m<sup>1/2</sup>)</b>	1.5	1.3	1.4
<b>Constante dieléctrica</b>	21	18	19
<b>Estabilidad térmica (°C)</b>	2300-2500		
<b>Conductividad iónica (S/cm)</b>	10 <sup>-3</sup> a 1000°C	10 <sup>-2</sup> a 1000°C	10 <sup>-3</sup> a 1000°C
<b>Índice de refracción</b>	2.1	2.0	2.05
<b>Absorción óptica (nm)</b>	220 - 320	250 - 350	230 – 340
<b>Propiedades magnéticas</b>	Diamagnético		

Los valores absolutos de evaporación del zirconato de estroncio (SrZrO<sub>3</sub>) en el intervalo de temperatura de 1700-2000 °C son comparables a los de la espinela de

magnesia, lo que sugiere que este material puede desempeñar un papel fundamental en aplicaciones que requieren estabilidad térmica en condiciones extremas. La capacidad del zirconato de estroncio para mantener sus propiedades aislantes, incluso a temperaturas muy elevadas, lo hace especialmente valioso en entornos exigentes, como los que se encuentran en procesos industriales de alta temperatura. Además, su alta resistencia a la corrosión por vapores alcalinos, junto con su elevado punto de fusión, contribuye a su durabilidad y rendimiento en aplicaciones severas, como en la metalurgia y la energía nuclear.

Las propiedades destacadas de los materiales cerámicos de zirconato de estroncio han permitido su integración en diversas industrias, incluyendo la producción de refractarios, pastas para crisoles en fundiciones de metales y como materiales estructurales en hornos de alta temperatura. Más recientemente, el zirconato de estroncio ha encontrado nuevas aplicaciones en la fabricación de celdas solares, donde su inclusión ha demostrado aumentar significativamente la eficiencia de estos sistemas, pasando del 3.8% a aproximadamente el 20.1%. Este avance tecnológico ha convertido a las celdas solares de perovskita en un campo de interés creciente desde 2014, gracias a sus altas eficiencias y bajos costos de producción, lo que ha llevado a varias empresas a explorar su comercialización desde 2017[70–73].

#### **1.2.1.5. Propiedades Generales**

##### **1. Estructura Cristalina y Conducción:**

La estructura del zirconato de estroncio es fundamental para su comportamiento físico y químico. La disposición de los cationes y aniones en su red cristalina no solo determina sus características mecánicas, sino que también permite una alta movilidad iónica, especialmente en condiciones de alta temperatura. Esta propiedad lo convierte en un candidato prometedor para aplicaciones en celdas de combustible, donde la conductividad iónica es esencial para el transporte de iones en electrolitos sólido[74–76].

##### **2. Propiedades Ópticas y Band Gap:**

Con un band gap de aproximadamente 5.6 eV, el zirconato de estroncio actúa como un buen aislante eléctrico y tiene aplicaciones potenciales en fotónica.

Su capacidad para absorber y emitir luz puede ser manipulada para desarrollar dispositivos ópticos avanzados, como LEDs y láseres de alta eficiencia. Además, su alta transparencia en el rango visible sugiere aplicaciones en la creación de recubrimientos ópticos y dispositivos de pantalla[74,77–80].

### **3. Estabilidad Térmica y Química:**

El elevado punto de fusión (2700 °C) del zirconato de estroncio es un indicador de su estabilidad térmica, lo que lo hace ideal para aplicaciones en condiciones extremas. La resistencia a la corrosión por vapores alcalinos amplía su aplicabilidad en procesos metalúrgicos y en la industria nuclear, donde la durabilidad y la integridad del material son críticas[77,81,82].

### **4. Propiedades Ferroeléctricas:**

Algunas fases de zirconato de estroncio presentan propiedades ferroeléctricas, lo que significa que pueden polarizarse bajo la influencia de un campo eléctrico aplicado. Estas propiedades son fundamentales para el desarrollo de dispositivos electrónicos, tales como capacitores de alta capacidad, memoria ferroeléctrica y sensores, donde se requiere una respuesta rápida y eficiente a cambios eléctricos[83–85].

Su capacidad para manipular ondas electromagnéticas y su potencial para ser combinado con otros materiales permiten el diseño de estructuras innovadoras que pueden ofrecer propiedades ópticas, eléctricas y mecánicas mejoradas. Estas características hacen del zirconato de estroncio un candidato ideal para el desarrollo de dispositivos multifuncionales y tecnologías avanzadas, ampliando su aplicabilidad en campos emergentes como la fotónica, la electrónica y la nanotecnología[86,87].

#### **1.2.1.6. Aplicaciones en Metamateriales**

El zirconato de estroncio posee características que lo hacen un candidato ideal para la investigación y el desarrollo de metamateriales, que son materiales diseñados para interactuar de manera única con ondas electromagnéticas:

- **Manipulación de Ondas Electromagnéticas:**

Debido a su alta constante dieléctrica y a su capacidad para polarizarse bajo un campo eléctrico, el zirconato de estroncio puede ser utilizado para diseñar estructuras que manipulan ondas electromagnéticas. Esto es crucial para el desarrollo de dispositivos de invisibilidad y tecnologías de cloaking, que buscan ocultar objetos de la detección de radar y luz visible[88,89].

- **Estructuras Híbridas y Compuestas:**

El potencial del zirconato de estroncio se extiende al diseño de materiales compuestos y estructuras híbridas que combinan sus propiedades con las de otros materiales, como metales o cerámicas avanzadas. Estas combinaciones pueden resultar en metamateriales que poseen propiedades mecánicas y electromagnéticas mejoradas, como una mayor resistencia a la deformación o propiedades acústicas específicas[90–92].

- **Desarrollo de Sistemas Multifuncionales:**

La capacidad del zirconato de estroncio para exhibir múltiples propiedades, como ferroelectricidad y conductividad iónica, permite su uso en sistemas multifuncionales. Estos sistemas podrían integrar funciones ópticas, eléctricas y mecánicas en un solo material, lo que es esencial para la creación de dispositivos compactos y versátiles en la tecnología moderna[93,94].

- **Investigación en Nanomateriales:**

La nanotecnología ofrece una plataforma para explorar aún más las propiedades del zirconato de estroncio. La creación de nanopartículas y nanocompuestos de zirconato de estroncio puede dar lugar a nuevos metamateriales con propiedades tunables y mejoradas, abriendo la puerta a aplicaciones en áreas como la medicina, donde se pueden utilizar para la liberación controlada de fármacos o como agentes de contraste en imágenes médicas[95–99].

La exploración de materiales avanzados como el zirconato de estroncio en estructuras de tipo perovskita establece una base sólida para ampliar el estudio hacia otros sistemas materiales con configuraciones y aplicaciones potencialmente disruptivas. En este contexto, el análisis de aleaciones metálicas y, en particular, de

aleaciones bimetálicas, representa un paso natural. Ambos casos comparten el objetivo de optimizar y aprovechar propiedades únicas mediante el ajuste preciso de sus estructuras cristalinas y composiciones, buscando maximizar el rendimiento en condiciones extremas. La comparación y estudio conjunto de ambos materiales no solo permite un entendimiento integral de sus propiedades, sino que también abre posibilidades para diseñar nuevos metamateriales y componentes híbridos que combinen las ventajas de los cerámicos y los metálicos en una sola estructura funcional avanzada.

### **1.2.2. Aleaciones metálicas**

Una aleación se define como la combinación de dos o más elementos, en la cual al menos uno de estos es un metal, con el objetivo de formar un nuevo material que incorpore las propiedades individuales de sus componentes en una estructura única. En términos generales, las aleaciones pueden considerarse como mezclas físicas, dado que, en la mayoría de los casos, los elementos constitutivos no experimentan reacciones químicas; es decir, no se forman enlaces covalentes o iónicos significativos entre los átomos, y la estructura cristalina resultante que conserva las características fundamentales de sus componentes. Sin embargo, a nivel microestructural, pueden presentarse fases distintas o segregaciones de elementos en función de las condiciones de procesamiento, lo que contribuye a las propiedades específicas de cada aleación.

Por lo general, las aleaciones involucran materiales metálicos, aunque también pueden incluirse elementos no metálicos para ajustar propiedades específicas, como la resistencia a la corrosión, la dureza o la resistencia mecánica. Las propiedades metálicas esenciales, tales como el brillo, la conductividad térmica y eléctrica, la ductilidad y la maleabilidad, son preservadas en el material resultante, aunque ajustadas de acuerdo con las proporciones y tipos de elementos añadidos. Este proceso de aleación es una práctica fundamental en la industria siderúrgica y de materiales, siendo esencial para la obtención de materiales como el bronce (aleación de cobre y estaño) y el latón (aleación de cobre y zinc), los cuales ofrecen ventajas específicas sobre los metales puros[100–102].

Las aleaciones suelen componerse de al menos dos componentes principales: una base, que es el material predominante, y los materiales aleantes, que se añaden en diversas proporciones para modificar las propiedades del material base. La proporción de cada elemento en la aleación tiene un impacto directo en las propiedades del material final; por ejemplo, pequeñas cantidades de un elemento aleante, como el carbono en el acero, pueden transformar significativamente sus características de dureza, tenacidad y resistencia. En función de la aplicación específica, las proporciones de aleantes pueden variar desde porcentajes mínimos (0.2-2%) hasta niveles significativamente más altos, lo cual determina la microestructura y las propiedades mecánicas finales del material[103–105].

Entre las aleaciones metálicas comunes, encontramos ejemplos ampliamente utilizados en aplicaciones industriales, como el acero (una aleación de hierro y carbono), el duraluminio (aluminio y cobre), el peltre (aleación de estaño con cobre, antimonio y plomo), el oro blanco (oro mezclado con níquel o paladio para aumentar su dureza y alterar su color) y el magnalio (aluminio y magnesio), cada una destacándose en sectores específicos gracias a sus propiedades físicas y mecánicas adaptadas. Dentro del ámbito de las aleaciones metálicas, existen además tipos avanzados con propiedades únicas, como las aleaciones con memoria de forma, que poseen la capacidad de "recordar" una forma predeterminada cuando son sometidas a cambios de temperatura o tensión. Este tipo de aleaciones, en aplicaciones de alta tecnología y medicina, ejemplifican el potencial de las aleaciones avanzadas en transformar el enfoque de diseño y funcionalidad en dispositivos estructurales y componentes mecánicos de precisión[106–108].

Además de las aleaciones tradicionales, existe un grupo especializado de aleaciones conocido como aleaciones con memoria de forma (SMA, por sus siglas en inglés), el cual se distingue por su capacidad para "recordar" una forma predeterminada y regresar a ella cuando se someten a estímulos específicos, como cambios de temperatura o aplicación de fuerzas mecánicas. Estas aleaciones presentan una transformación de fase reversible, conocida como transformación martensítica, que ocurre a nivel atómico. A través de esta transformación, el material

puede deformarse de manera considerable y, una vez retirado el estímulo externo o alcanzada una temperatura crítica, recupera su forma original. Esta propiedad les permite a las SMA responder de manera activa a su entorno, convirtiéndolas en candidatas para aplicaciones en las que es necesario un control preciso de movimiento y recuperación de forma, tales como actuadores, dispositivos médicos y sistemas de control en estructuras aeroespaciales.

En este contexto, el desarrollo y la optimización de aleaciones con memoria de forma representan un campo en expansión dentro de la ciencia de materiales. La investigación actual se enfoca en mejorar la resistencia térmica, la durabilidad y la eficiencia de respuesta de estos materiales bajo condiciones extremas. Además, el análisis microestructural y el modelado computacional de sus mecanismos de transformación están permitiendo desarrollar SMA con propiedades personalizadas para aplicaciones específicas, potenciando su uso en la robótica de alta precisión, dispositivos de asistencia médica y componentes de alta ingeniería en aeronáutica y automoción. El potencial de innovación que presentan estas aleaciones ilustra el impacto significativo que los materiales inteligentes y multifuncionales pueden tener en el diseño de dispositivos adaptativos y en la ingeniería de materiales avanzados.

#### **1.2.2.1. Aleaciones metálicas con memoria de forma**

Todos los metales son elásticos hasta cierto punto. Es decir, los podemos deformar un poco (menos del 0,2 %) aplicándole una fuerza, y al quitarle la fuerza, el material retorna sin problemas a su forma original. En cambio, si el metal se deforma más allá de su límite elástico, la pieza queda deformada, ya que la deformación plástica es un fenómeno intrínsecamente irreversible. Como ejemplo de ello, podemos tomar un clip común para papel y retorcerlo con los dedos, con la seguridad de que el clip quedará con la forma que le dio, sin poder retomar por sí solo su forma original[109–113].

En cambio, los llamados metales con memoria de forma tienen la característica no común, de que al ser deformados (poco o mucho) son capaces de recordar y de recuperar su forma original, por simple calentamiento. A estos materiales también se les llama materiales inteligentes. Este efecto fue observado por la ciencia hace relativamente poco tiempo, a mediados del siglo pasado.

Algunos materiales con memoria de forma pueden también presentar el fenómeno denominado pseudoelasticidad, otra verdadera anomalía de la naturaleza. En este caso, el material puede ser deformado mucho mediante una fuerza mecánica y al dejar de aplicarla, el material recupera su forma original, sin necesidad de calentarlo. Ambos efectos tienen lugar para deformaciones que pueden llegar hasta el 20 % y se presentan, por ejemplo, en aleaciones: cobre-zinc-aluminio, níquel-titanio; hierro-manganeso-silicio y otras[114,115].

Este fenómeno se puede asumir a que, dada presión y temperatura, toda aleación presenta una estructura atómica bien definida, ocupando cada átomo una posición específica en el espacio. Pero al enfriar el material, su estructura interna se modificará porque los átomos que la componen cambiarán de posición buscando la mayor estabilidad.

Normalmente, un cambio de estructura implica difusión (es decir, los átomos saltan a posiciones vecinas o se produce infiltración de partículas ajenas al material), lo que entorpece el efecto memoria. Pero, si el cambio de estructura no implica difusión (situación no común), entonces al calentarse el material, los átomos de su estructura recorrerán el mismo camino en sentido inverso, volviendo los átomos a las posiciones iniciales, y el material recuperará la forma original. En la modificación de la estructura de los materiales pseudoelásticos, tampoco existe difusión[116–120].

#### **1.2.2.2. Aplicaciones**

Dentro del ámbito de las aleaciones con memoria de forma, las aleaciones de níquel-titanio (Nitinol) destacan no solo por sus propiedades mecánicas y su capacidad de recordar formas, sino también por su biocompatibilidad, una característica esencial para su empleo en aplicaciones médicas que requieren contacto directo con tejidos vivos. Esta propiedad permite el desarrollo de dispositivos implantables que interactúan con el cuerpo humano sin generar reacciones adversas, haciendo del Nitinol un material ideal para aplicaciones como stents, implantes y dispositivos ortopédicos. Además, una de las características más notables de estas aleaciones es la considerable fuerza de recuperación que generan cuando intentan retornar a su forma original. En casos donde el material

no puede recuperar su forma completamente, se acumulan fuerzas internas significativas, que pueden aprovecharse en aplicaciones médicas y de ingeniería.

Por ejemplo, en el Centro Atómico Bariloche, se están desarrollando dispositivos externos para corregir desviaciones óseas, utilizando esta fuerza de recuperación para aplicar presiones controladas sobre estructuras esqueléticas sin necesidad de implantes invasivos. Este enfoque permite el uso de aleaciones de níquel-titanio en aplicaciones médicas sin la restricción de biocompatibilidad. La misma fuerza de recuperación es útil en la industria para aplicaciones complejas, como la unión de tubos en entornos de difícil acceso donde no es viable la soldadura, o para desplegar antenas de satélites en órbita de manera controlada, al liberar la antena a través de mecanismos que se activan a distancia.

Las propiedades de las aleaciones con memoria de forma también ofrecen soluciones innovadoras en la construcción de edificios sismo-resistentes. Las investigaciones actuales exploran cómo incorporar estas aleaciones en marcos de ventanas y otras estructuras arquitectónicas para actuar como disipadores de energía durante sismos. La capacidad de estos materiales para deformarse y recuperar su forma permite que una porción significativa de la energía sísmica se disipe en el proceso de transformación de fase, minimizando el daño en los elementos estructurales del edificio. Además, en el contexto de la conservación de obras de arte, las aleaciones de cobre-zinc-aluminio se están investigando como una opción viable para absorber vibraciones que podrían dañar piezas delicadas en museos, una aplicación que también está en desarrollo en el laboratorio mediante el uso de aleaciones base cobre y de níquel-titanio. Así, las propiedades únicas de estos materiales los convierten en candidatos versátiles para una amplia gama de aplicaciones donde la gestión de fuerzas y energía es crucial, desde el campo biomédico hasta la ingeniería de estructuras y la conservación del patrimonio cultural[121–129].

Las aleaciones con memoria de forma, especialmente las de níquel-titanio, constituyen un área de investigación altamente prometedora debido a su capacidad para recuperar su forma original tras ser deformadas, generando fuerzas internas significativas en el proceso. Esta propiedad es crucial para su aplicación en

dispositivos médicos, donde se están desarrollando soluciones innovadoras para corregir desviaciones óseas mediante dispositivos externos que no requieren biocompatibilidad. Además, su utilización en la unión de componentes metálicos en situaciones donde la soldadura es impracticable ofrece nuevas vías para la mejora de la manufactura y el ensamblaje de estructuras complejas. Otro aspecto de gran interés radica en su potencial para ser integradas en diseños de estructuras sismo-resistentes, donde su capacidad para disipar energía a través de deformaciones controladas podría ser esencial para preservar la integridad de los edificios durante eventos sísmicos. Por lo tanto, es pertinente explorar no solo las aplicaciones de las aleaciones con memoria de forma, sino también cómo se pueden combinar con otras aleaciones, como las de CdAu, CdAg y ZnCu, para la creación de metamateriales que amplíen el rango de aplicaciones tecnológicas y estructurales en el futuro.

### **1.2.2.3. Aleación CdAu (Cadmio-Oro)**

La aleación CdAu representa una combinación poco común, pero con un alto potencial de aplicabilidad en campos especializados debido a sus propiedades únicas. Al integrar cadmio y oro, esta aleación aprovecha la ductilidad y estabilidad química del oro junto con la baja densidad y punto de fusión del cadmio, logrando una estructura que resiste eficazmente la oxidación y mantiene una buena estabilidad bajo condiciones químicamente agresivas. Además, la presencia de oro dota a la aleación de una excelente conductividad eléctrica y térmica, lo que es crítico en dispositivos electrónicos de precisión y en ambientes donde la integridad de la señal eléctrica es crucial. Esta aleación también presenta características electrónicas que la hacen atractiva para su uso en sensores, dispositivos optoelectrónicos y aplicaciones de almacenamiento de energía. En el contexto de metamateriales, la aleación CdAu podría usarse en dispositivos de protección o amortiguación de señales, donde la resistencia a la corrosión y la estabilidad estructural bajo condiciones extremas son indispensables. Estos atributos sitúan a la aleación CdAu como una opción viable para aplicaciones en ambientes de alta exigencia química y eléctrica, en los que se requiere una combinación de resistencia y funcionalidad electrónica controlada.

#### **1.2.2.4. Aleación CdAg (Cadmio-Plata)**

La aleación CdAg combina las excepcionales propiedades conductivas de la plata con las características de bajo costo y menor peso aportadas por el cadmio. Este material es altamente reflectante, lo que lo hace particularmente útil en aplicaciones ópticas, como en la producción de espejos de alta precisión y en recubrimientos de fibra óptica que requieren eficiencia en la transmisión y reflexión de luz. La CdAg también conserva una buena conductividad térmica y una resistencia moderada a la corrosión, cualidades que favorecen su implementación en sistemas termoeléctricos y en dispositivos fotónicos, donde la estabilidad bajo variaciones térmicas es esencial para mantener el rendimiento del sistema. En el ámbito de los metamateriales, las propiedades de reflectividad y alta conductividad de CdAg permiten diseñar materiales con respuestas ópticas y electromagnéticas controladas, lo cual es fundamental en el desarrollo de dispositivos avanzados de manipulación de ondas. Estas aplicaciones encuentran utilidad en sistemas de comunicación óptica, dispositivos de recolección de energía y componentes de protección térmica y eléctrica, donde la estructura de la aleación CdAg se puede optimizar para maximizar su eficiencia en la gestión de las propiedades ópticas y de transmisión.

#### **1.2.2.5. Aleación ZnCu (Zinc-Cobre)**

La aleación ZnCu, conocida comercialmente como latón, es ampliamente reconocida por su alta resistencia mecánica, durabilidad y excelente resistencia a la corrosión. Estas propiedades han consolidado su uso en aplicaciones que van desde elementos estructurales hasta componentes decorativos en diversas industrias. La combinación de zinc y cobre produce una aleación con alta resistencia a la tracción, lo que permite que el material soporte grandes cargas mecánicas sin deformarse fácilmente, además de ofrecer una buena conductividad térmica. Esto resulta particularmente beneficioso en aplicaciones donde se requiere un equilibrio entre resistencia y transferencia de calor, como en intercambiadores de calor, sistemas de tuberías y elementos de maquinaria que operan a temperaturas elevadas. En la ingeniería de metamateriales, el ZnCu se destaca por su versatilidad de manufactura y su estabilidad estructural, características esenciales para la creación de diseños complejos y estructuras de soporte que deban resistir

deformaciones bajo esfuerzos cíclicos. Al integrar ZnCu en estructuras de metamateriales, se puede lograr un comportamiento altamente controlado, ideal para dispositivos de amortiguación y estructuras sismo-resistentes. La capacidad de este material para conservar sus propiedades bajo diversas condiciones ambientales refuerza su aplicabilidad en sistemas donde la fiabilidad y la longevidad del material son primordiales, abriendo posibilidades en la creación de estructuras auto-amortiguadoras y componentes disipadores de energía en entornos altamente exigentes.

Estas aleaciones no solo presentan una gama de propiedades mecánicas, eléctricas y térmicas que las hace idóneas para aplicaciones especializadas, sino que también ofrecen el potencial de ser adaptadas y mejoradas para el diseño de metamateriales. A medida que la investigación en materiales continúa avanzando, las posibilidades de optimizar estas aleaciones para aplicaciones multifuncionales abren nuevas oportunidades en áreas como la absorción de energía, la protección ante vibraciones y la manipulación de ondas electromagnéticas.

Las aleaciones con memoria de forma (SMA), como el níquel-titanio, y los materiales cerámicos como el zirconato de estroncio ( $\text{SrZrO}_3$ ) representan dos enfoques complementarios en el desarrollo de metamateriales avanzados. Las SMA son excepcionales por su capacidad de recuperar su forma original tras deformaciones, generando fuerzas internas útiles para aplicaciones de alto rendimiento, como dispositivos médicos y sistemas estructurales adaptativos en edificaciones sismo-resistentes. En contraste, el zirconato de estroncio destaca por su alta estabilidad térmica, resistencia a la corrosión y excelentes propiedades dieléctricas, manteniéndose estructuralmente estable en condiciones extremas, lo cual lo hace adecuado para entornos industriales y sistemas de almacenamiento energético. Así, mientras las aleaciones con memoria de forma ofrecen adaptabilidad y respuesta activa, el  $\text{SrZrO}_3$  proporciona durabilidad y aislamiento en condiciones severas, posicionando a ambos materiales como alternativas de vanguardia para aplicaciones complejas y exigentes en metamateriales multifuncionales.

### 1.2.3. Metamateriales

El término "metamateriales" proviene del griego "meta", que significa "más allá de". Este nombre se debe a que los metamateriales son estructuras artificiales con una homogeneidad efectiva que les confiere propiedades inusuales. El concepto de metamateriales fue introducido por primera vez en 1968 por el Dr. Víctor Veselago, quien exploró la posibilidad de que las ondas electromagnéticas se propagaran a través de un medio material con permitividad eléctrica  $\epsilon$  y permeabilidad magnética  $\mu$  negativas simultáneamente. Esta condición produce una inversión de la ley de Snell<sup>1</sup>.

Actualmente, se ha abierto un amplio campo de investigación en el electromagnetismo avanzado gracias a la capacidad de controlar las propiedades electromagnéticas de estas estructuras. Los metamateriales, con su estructura de homogeneidad efectiva, permiten explorar nuevas aplicaciones y fenómenos en este ámbito[130–134].

Una estructura con homogeneidad efectiva es aquella en la que el tamaño de celda o la distancia promedio entre los componentes, denominada  $p$ , es mucho menor que la longitud de onda de la señal que se guía a través de ella,  $\lambda_g$  (Ecuación 1.1).

$$p < \lambda_g/4$$

*Ecuación 1.1 Límite de homogeneidad efectiva.*

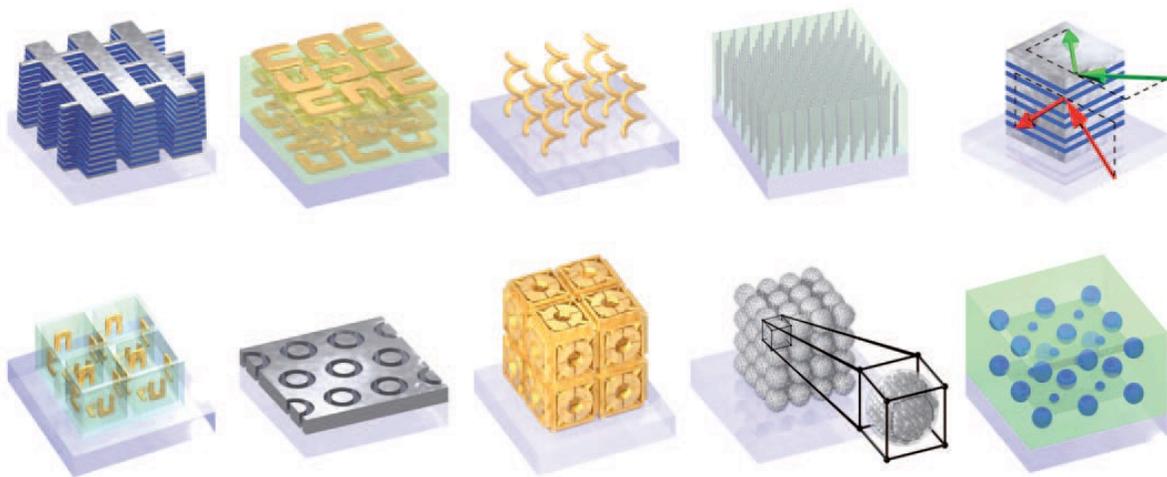
Esta condición asegura que el fenómeno de refracción dominará sobre el fenómeno de dispersión cuando una onda se propague a través de un metamaterial (MTM<sup>2</sup>). Si se cumple esta condición, la estructura se comporta como un material homogéneo en el sentido de que las ondas no perciben el enrejado de la estructura, sino que la perciben como una unidad continua y no como una combinación de componentes individuales; en otras palabras, la estructura es electromagnéticamente uniforme en la dirección de la propagación de las ondas.

---

<sup>1</sup> Ley de Snell: Establece que una onda (por ejemplo, un rayo de luz) cambia su dirección “se dice que se refracta”, cuando pasa de un medio transparente a otro medio transparente con una velocidad de fase diferente. Fórmula de la ley de Snell  $n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$

<sup>2</sup> MTM: Metamaterial

Actualmente, las estructuras metamateriales se basan principalmente en dos tipos de materiales: metales y dieléctricos, que presentan un ordenamiento específico como se ilustra en la Figura 1.2[135]. En esta figura, las partes doradas representan el metal oro, las partes grises corresponden a la plata y la combinación de tonos azules y transparentes se refiere a los materiales dieléctricos (algunos cerámicos). La elección de estos materiales se debe a que los metales como el oro y la plata exhiben permeabilidad magnética negativa, mientras que los dieléctricos presentan permitividad eléctrica negativa. Estos materiales se organizan de manera que complementan ambas propiedades, permitiendo un control preciso sobre la propagación de ondas electromagnéticas en el material diseñado [136–141].



*Figura 1.2 Metamateriales fotónicos.*

Debido al estudio de estos elementos y materiales en el desarrollo de estos sistemas, los metamateriales se podrían clasificar en cuadrantes dependiendo las magnitudes de la permeabilidad magnética y la permitividad eléctrica como se muestra a continuación.

- Permitividad negativa y permeabilidad positiva; denominados como materiales ENG (épsilon negativa).
- Permitividad y permeabilidad positivas; denominados como materiales DPS (doble positivo).
- Permitividad y permeabilidad negativas; denominados como materiales DNG (doble negativo).

- Permitividad positiva y permeabilidad negativo; denominados como materiales MNG ( $\mu$  negativo).

En la Figura 1.3 se puede observar lo antes mencionado de forma gráfica donde se aprecia lo mencionado.

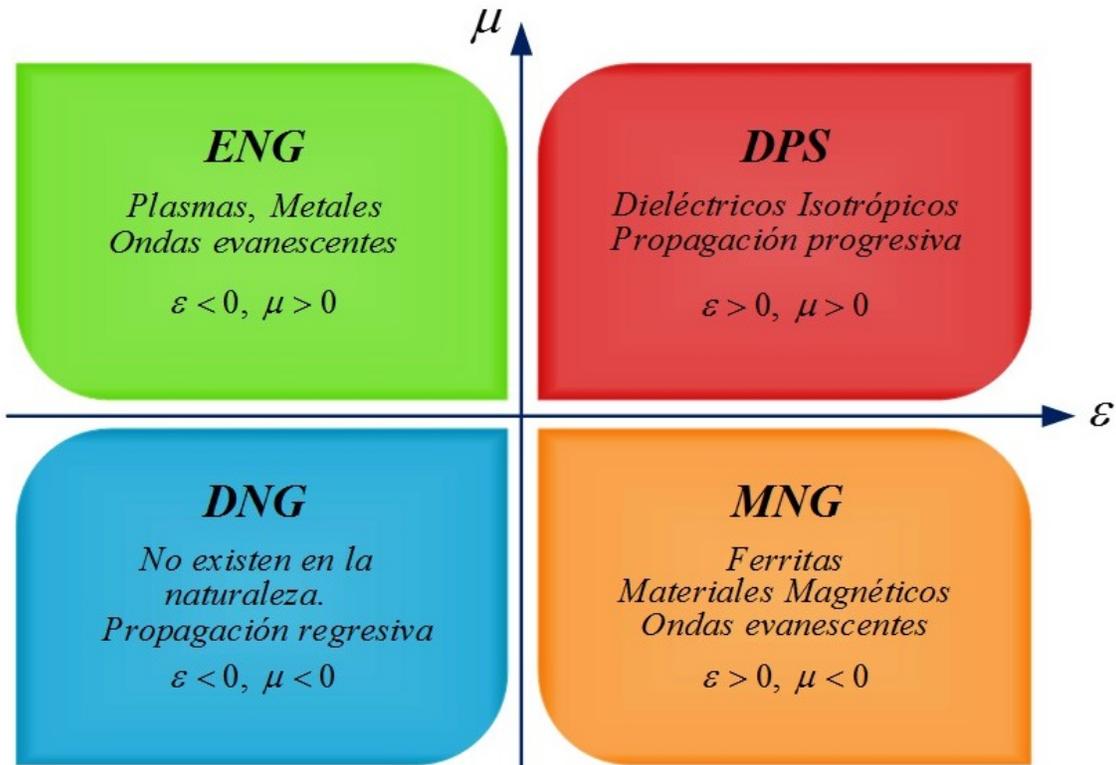


Figura 1.3 Representación de sistemas con épsilon y mu con diferentes signos.

Los materiales que han capturado recientemente la atención de ingenieros y científicos en el campo de la electromagnética son los denominados "**Doble Negativo**" (**DNG**). Estos materiales no se encuentran en la naturaleza, pero pueden ser fabricados artificialmente. Los **DNG** también se conocen por otros términos, como **NRI** (índice de refracción negativo), **NIM** (material de índice negativo), **BW** (propagación reversa) y **LH** (material zurdo), entre otros. Sin embargo, para mayor claridad y simplicidad, utilizaremos la designación **DNG**.

La clase **DNG** ha generado un gran interés debido a sus propiedades únicas, que han llevado a numerosos esfuerzos para aprovechar estas características en el diseño y mejora de diversas aplicaciones. Entre ellas se incluyen lentes, circuitos de microondas, líneas de transmisión, antenas, variadores de fase, divisores de

potencia de banda ancha, antenas de anillo eléctricamente pequeñas, camuflaje o invisibilidad, nanohilos plasmónicos, cristales fotónicos y la miniaturización, entre otros.

Dado a que estos materiales presentan una estructura compleja que permite la modificación en su permitividad eléctrica y su permeabilidad magnética tomando un valor negativo (DNG) también se les conoce también como materiales zurdos (Left Handed Materials o LHM).

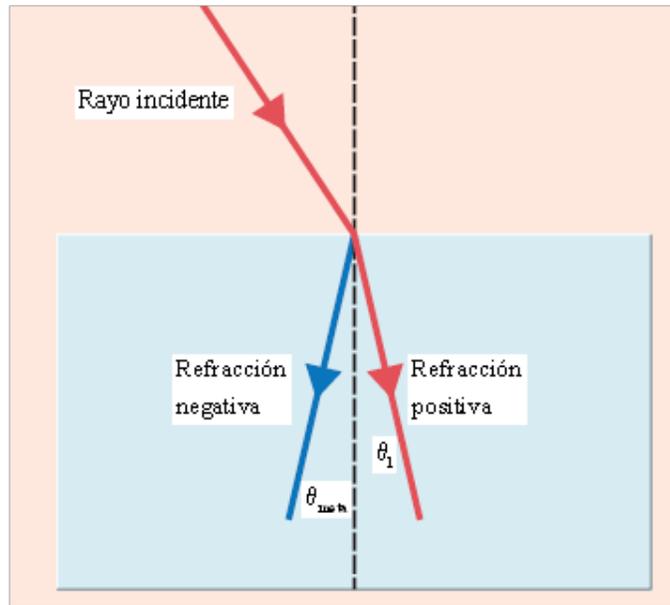
### **1.2.3.1. Materiales Zurdos (Left-Handed Materials ó LHM)**

En un LHM tomamos el signo negativo a la hora de definir el índice de refracción → medios de índice negativo o Negative Index Media (NIMs) como se presenta en la Ecuación 1.2.

$$n = -\sqrt{\epsilon_r \mu_r}$$

*Ecuación 1.2 Medios de índice de refracción negativo.*

Como consecuencia, las ondas electromagnéticas que pasan de un medio convencional (RHM) a un medio zurdo se refractan hacia el mismo lado de la normal, un fenómeno conocido como refracción negativa, como se ilustra en la Figura 1.4. Este comportamiento se debe a la combinación de un medio con valores negativos tanto en la permitividad eléctrica ( $\epsilon$ ) como en la permeabilidad magnética ( $\mu$ ), lo que a su vez modifica el índice de refracción del material a una magnitud negativa. Este efecto permite la creación de materiales que pueden proporcionar invisibilidad a ciertas frecuencias de radiación electromagnética[142].



*Figura 1.4 Refracción Negativa.*

El fenómeno de refracción negativa permitiría la manipulación de las ondas electromagnéticas en un medio material.

### 1.2.3.2. Refracción Negativa

La característica más estudiada y significativa de los medios LHM (Left-Handed Materials) es el signo negativo en su índice de refracción. En el contexto de metamateriales, el concepto de índice de refracción negativo es fundamental. Para aplicaciones como dispositivos de camuflaje y superantenas, es suficiente que el índice de refracción diseñado varíe entre valores menores a 1 y 0[143].

Este comportamiento se puede entender mejor analizando la ley de Snell, como se presenta en la Ecuación 1.3.

$$n_1 \sin \theta_1 = n_2 \sin \theta_2$$

*Ecuación 1.3 Ley de Snell.*

Cuando el índice de refracción del metamaterial es  $n_2 = -1$ , la Ecuación 1.3 se transforma en la Ecuación 1.4.

$$n_1 \sin \theta_1 = -\sin \theta_2$$

*Ecuación 1.4 Ley de Snell con valor negativo de  $n_2$ .*

Como se muestra en la ecuación anterior, un rayo incidente en un metamaterial se refractará hacia el mismo lado de la normal que el rayo incidente. Esto se debe

a que, cuando el índice de refracción de un medio es negativo, el ángulo de refracción, según la ley de Snell, también debe ser "negativo". En otras palabras, la refracción es anómala, y el ángulo refractado se encuentra en el mismo lado de la normal de la interfaz que el ángulo de incidencia.

Estas propiedades se deben al diseño específico de las estructuras de metamateriales. Los métodos de fabricación de estos materiales suelen basarse en dos enfoques principales: el método descendente (Top-Down) y el método ascendente (Bottom-Up). A continuación, se presenta una técnica utilizada en la fabricación de metamateriales.

#### **1.2.3.3. Metamateriales mecánicos (Materiales Auxéticos)**

Los metamateriales mecánicos son materiales artificiales diseñados para exhibir propiedades mecánicas que no se encuentran en los materiales convencionales. Estas propiedades emergen principalmente de su estructura a escala micro o nano, que está meticulosamente diseñada para influir en su comportamiento macroscópico. La investigación en metamateriales mecánicos abarca diversas disciplinas, incluyendo física, ingeniería mecánica, ciencia de materiales y matemática aplicada[144–146].

#### **1.2.3.4. Propiedades únicas**

#### **1.2.3.5. Coeficiente de Poisson Negativo**

Los metamateriales auxéticos se expanden lateralmente cuando se estiran longitudinalmente, a diferencia de los materiales convencionales. El coeficiente de Poisson ( $\nu$ ) es una medida de la tendencia de un material a deformarse en dirección perpendicular a la dirección de la carga aplicada. Para la mayoría de los materiales, este coeficiente es positivo, lo que significa que, si se estira en una dirección, el material se contrae en las direcciones perpendiculares, y viceversa. Sin embargo, los materiales auxéticos tienen un coeficiente de Poisson negativo ( $\nu < 0$ ) (ver Ecuación 1.5), lo que significa que se expanden lateralmente cuando se estiran longitudinalmente, y se contraen lateralmente cuando se comprimen longitudinalmente[147–150].

$$\nu = -\frac{e_{yy}}{e_{xx}} = -\frac{e_{zz}}{e_{xx}}$$

*Ecuación 1.5 Coeficiente de Poisson.*

### **1.2.3.6. Propiedades y Características de los Materiales Auxéticos**

#### **Expansión Transversal bajo Tensión**

- Los materiales auxéticos se expanden en las direcciones perpendiculares cuando se estiran. Esto puede ser útil en aplicaciones donde se requiere una alta energía de absorción o resistencia al impacto.

#### **Resistencia Mejorada**

- Debido a su comportamiento único, los materiales auxéticos pueden tener una mayor resistencia a la fractura y una mejor capacidad de absorción de energía en comparación con los materiales convencionales.

#### **Comportamiento Anómalo de las Ondas**

- Las ondas mecánicas pueden propagarse de manera diferente en materiales auxéticos, lo que los hace útiles para aplicaciones de control de vibraciones y aislamiento acústico.

### **1.2.3.7. Aplicaciones Prácticas de los Materiales Auxéticos**

#### **1. Dispositivos Médicos**

- Implantes ortopédicos: Los materiales auxéticos pueden imitar mejor las propiedades del tejido biológico y mejorar la integración ósea.
- Stents vasculares: La expansión uniforme puede reducir el riesgo de daño a las paredes arteriales.

#### **2. Protección y Seguridad**

- Armaduras y chalecos antibalas: Los materiales auxéticos pueden absorber mejor la energía de impacto, mejorando la protección.
- Equipos deportivos: Los cascos y protectores con materiales auxéticos pueden ofrecer una mejor amortiguación de impactos.

#### **3. Aislamiento de Vibraciones y Acústico**

- Los materiales auxéticos pueden ser diseñados para bloquear o redirigir ondas acústicas y vibraciones, mejorando el aislamiento en construcciones y equipos.

### 1.2.3.8. Ejemplos de Investigaciones y Desarrollo de Materiales Auxéticos

#### 1. Metamateriales Auxéticos 3D Impresos

- Investigaciones recientes han explorado el uso de la impresión 3D para crear estructuras auxéticas con geometrías complejas. Estos materiales impresos pueden ser ajustados para tener propiedades específicas mediante el control de los parámetros de impresión y el diseño geométrico.

#### 2. Nanomateriales Auxéticos

- Se han desarrollado materiales auxéticos a nanoescala, como los nanotubos de carbono y grafeno con estructuras reentrantes, que muestran propiedades auxéticas excepcionales. Estos materiales tienen aplicaciones potenciales en electrónica flexible y dispositivos nano-mecánicos[18,20].

### 1.2.3.9. Metamateriales acústicos

Los metamateriales acústicos son materiales diseñados para manipular ondas sonoras de maneras que los materiales naturales no pueden. Estos materiales pueden controlar, dirigir y enfocar el sonido, ofreciendo posibilidades únicas para aplicaciones en control de ruido, aislamiento acústico y tecnologías de ultrasonido.

### 1.2.3.10. Definición y propiedades fundamentales

Los metamateriales acústicos se caracterizan por su estructura periódica y sus propiedades a nivel microscópico, que difieren de las propiedades macroscópicas de los materiales convencionales[151–154]. Algunos conceptos clave incluyen:

- **Índice de refracción negativo:** Esta propiedad permite que las ondas sonoras se refracten en direcciones inusuales, abriendo posibilidades para la creación de lentes acústicas superresolutivas.
- **Bandgaps acústicos:** Similar a los bandgaps en materiales semiconductores, los metamateriales acústicos pueden tener bandas de frecuencia en las que las ondas sonoras no pueden propagarse, permitiendo aplicaciones en aislamiento acústico y control de ruido.

#### **1.2.3.11. Ejemplos de metamateriales acústicos**

1. **Cristales fonónicos:** Estructuras periódicas que crean bandgaps acústicos y pueden utilizarse para bloquear ciertas frecuencias de sonido.
2. **Materiales con índice de refracción negativo:** Utilizan resonadores para crear un índice de refracción negativo, lo que permite aplicaciones en lentes acústicas y dispositivos de focalización de sonido.

#### **1.2.3.12. Aplicaciones prácticas**

1. **Control de ruido:** Los metamateriales acústicos pueden diseñarse para bloquear o reducir significativamente el ruido en entornos industriales o urbanos.
2. **Aislamiento acústico:** Uso en construcción para mejorar el aislamiento acústico de edificios.
3. **Tecnologías médicas:** Aplicaciones en ultrasonido para mejorar la focalización de ondas acústicas, permitiendo imágenes médicas más precisas y tratamientos no invasivos.

#### **1.2.3.13. Metamateriales para energía**

En el campo de la energía, estos materiales ofrecen oportunidades para mejorar la eficiencia de los dispositivos de generación, recolección y almacenamiento de energía[155–159].

#### **1.2.3.14. Metamateriales Fotónicos**

Los metamateriales fotónicos manipulan la luz en escalas sub-longitud de onda. Estas estructuras pueden controlar la propagación de la luz mediante la creación de una banda prohibida fotónica, que actúa como un filtro de frecuencias específicas de la luz.[160,161]

#### **1.2.3.15. Aplicaciones en Energía Solar**

1. **Mejora de la Eficiencia de Celdas Solares**
  - Los metamateriales fotónicos pueden concentrar la luz solar y dirigirla a las regiones activas de las celdas solares, aumentando la eficiencia de conversión de energía.

- Ejemplo: Rejillas de difracción que mejoran la absorción en celdas de película delgada.

## **2. Celdas Solares Multiespectrales**

- Los metamateriales pueden ser diseñados para absorber una amplia gama de longitudes de onda, mejorando la captura de luz en condiciones de luz variable.

### **1.2.3.16. Metamateriales Termoeléctricos**

Los metamateriales termoeléctricos convierten el calor directamente en electricidad mediante el efecto Seebeck, donde una diferencia de temperatura a través del material genera una corriente eléctrica. La eficiencia de estos materiales depende de su capacidad para mantener una alta conductividad eléctrica y una baja conductividad térmica[162–164].

### **1.2.3.17. Aplicaciones en Conversión de Energía**

#### **1. Recolección de Energía Residual**

- En motores y plantas industriales, los metamateriales termoeléctricos pueden recolectar calor residual y convertirlo en electricidad útil.

#### **2. Generadores Termoeléctricos**

- En dispositivos portátiles, pueden ser usados para generar energía a partir del calor corporal.

### **1.2.3.18. Metamateriales para Almacenamiento de Energía**

Los metamateriales pueden mejorar significativamente las capacidades de almacenamiento de energía al ofrecer estructuras con alta densidad de energía y estabilidad química[165,166].

### **1.2.3.19. Aplicaciones en Baterías y Supercondensadores**

#### **1. Baterías de Iones de Litio**

- Metamateriales basados en grafeno y otros nanomateriales pueden aumentar la capacidad de almacenamiento y la velocidad de carga/descarga.

#### **2. Supercondensadores**

- Los metamateriales pueden ofrecer superficies de alta área específica para aumentar la capacitancia y la eficiencia energética.

Debido a las características antes mencionadas la fabricación de sistemas metamateriales se vuelve sumamente compleja por el tamaño, la estructura y características para cada aplicación, debido a esto trabajar con sistemas nanomateriales presenta una gran alternativa para el desarrollo y la mejora de los sistemas de estudio.

#### **1.2.4. Nanomateriales**

Este término es relativamente nuevo y contiene el prefijo “nano” que se asocia de forma sencilla a la escala nanométrica correspondiente ( $1 \times 10^{-9}$  m), también conocido como nanómetro. Según la Institución Británica de Estándares (BIS) se consideran nanomateriales aquellos que al menos una de sus dimensiones cuenta con un tamaño de 100nm o menos[167–172].

La clasificación de los nanomateriales según sus dimensiones es crucial para entender sus propiedades y aplicaciones. Esta clasificación se divide en cuatro categorías principales: cero-dimensionales (0D), unidimensionales (1D), bidimensionales (2D) y tridimensionales (3D).

##### **1.2.4.1. Nanomateriales 0D**

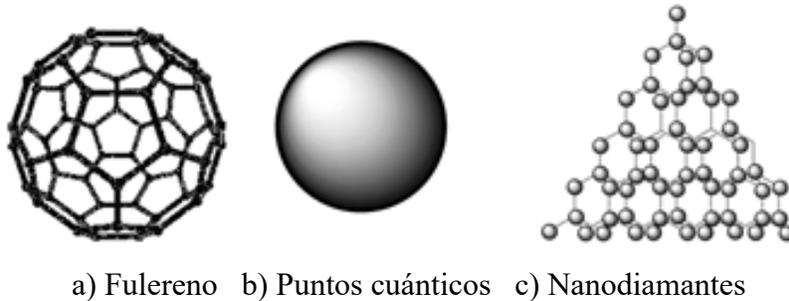
Los nanomateriales 0D (de dimensión cero) representan una categoría de nanomateriales en los que las tres dimensiones espaciales están confinadas en la escala nanométrica, sin extensiones significativas fuera de este rango. Debido a su confinamiento en las tres direcciones, los nanomateriales 0D presentan propiedades físicas y químicas completamente diferentes a las de sus equivalentes a mayor escala, en gran medida influenciadas por efectos cuánticos. Esta categoría de nanomateriales abarca partículas de tamaños de entre 1 y 10 nanómetros, que poseen una relación superficie-volumen extremadamente alta y, en consecuencia, una reactividad superficial aumentada. Estas características resultan en propiedades electrónicas y ópticas ajustables en función de su tamaño, que pueden ser aprovechadas en aplicaciones tecnológicas y biomédicas avanzadas:

- **Puntos cuánticos**, un ejemplo representativo de nanomateriales 0D, son nanocristales semiconductores que, debido al confinamiento cuántico, pueden emitir luz de diferentes longitudes de onda según su tamaño, lo cual permite el control preciso de su espectro de emisión. Este fenómeno hace que los puntos cuánticos sean particularmente valiosos en la biomedicina, donde son utilizados como agentes de contraste para la imagen molecular, y en tecnología de pantallas, como en pantallas QLED, donde se busca alta fidelidad de color y eficiencia energética. Además, los puntos cuánticos son prometedores en el desarrollo de sensores altamente sensibles debido a su capacidad de respuesta óptica ajustable[173–179].
- **Nanopartículas metálicas** como las de oro, plata y platino también forman parte de los nanomateriales 0D. Estas nanopartículas tienen aplicaciones que van desde la catalítica hasta la medicina y la electrónica. Las nanopartículas de oro, por ejemplo, presentan una notable resonancia de plasmones de superficie, lo que les permite interactuar de manera intensa con la luz, una propiedad que es aprovechada en la terapia fototérmica para el tratamiento de cáncer, donde las nanopartículas absorbentes son activadas por láser para destruir células tumorales selectivamente. También se utilizan en la imagen biomédica, donde la interacción con la luz mejora la visualización de estructuras específicas en el cuerpo[180–183].

Las propiedades ópticas y electrónicas de los nanomateriales 0D están fuertemente influenciadas por su tamaño y su composición, lo que permite personalizar sus funcionalidades para aplicaciones específicas. Variaciones mínimas en el tamaño pueden inducir cambios drásticos en sus propiedades debido al confinamiento cuántico, donde los electrones se limitan a moverse en espacios pequeños, modificando los niveles de energía y permitiendo la creación de materiales con propiedades altamente específicas. Esto abre posibilidades en áreas de vanguardia como la imagen de alta resolución, dispositivos fotónicos, y nanomedicina[184,185].

La Figura 1.5 ilustra ejemplos de nanomateriales 0D, destacando la diversidad de configuraciones y tamaños que pueden ser diseñados para alcanzar un control

preciso sobre sus propiedades y facilitar innovaciones en aplicaciones científicas y tecnológicas avanzadas. Esta visualización es clave para entender cómo la estructura y el tamaño de los nanomateriales 0D determinan sus aplicaciones, marcando una distinción significativa respecto a los materiales en bulto.



*Figura 1.5 Sistemas 0D.*

#### 1.2.4.2. Nanomateriales 1D

Los nanomateriales 1D (de una dimensión) se caracterizan por tener una dimensión extendida fuera de la escala nanométrica, generalmente en la longitud, mientras que las otras dos dimensiones permanecen en el rango nanométrico. Esta configuración geométrica confiere a los nanomateriales 1D propiedades únicas, que resultan en una alta anisotropía en sus características físicas, como la conductividad eléctrica y térmica, así como en sus propiedades mecánicas. La estructura alargada de los nanomateriales 1D facilita el transporte eficiente de carga y calor a lo largo de su longitud, lo que los hace idóneos para aplicaciones en tecnologías avanzadas de electrónica, energía y biomedicina. Ejemplos comunes incluyen:

- **Nanohilos y nanobarras** son ejemplos prominentes de nanomateriales 1D. Estas estructuras cilíndricas, con diámetros en el rango nanométrico y longitudes que pueden extenderse hasta dimensiones micrométricas o mayores, son esenciales en el desarrollo de dispositivos electrónicos y optoelectrónicos. En particular, los nanohilos de materiales semiconductores, como el silicio o el óxido de zinc, son utilizados en la fabricación de transistores de alta velocidad y bajo consumo, permitiendo reducir el tamaño de los dispositivos y aumentar su eficiencia. Asimismo, en aplicaciones de almacenamiento de energía, los nanohilos metálicos y de óxido de metales mejoran la eficiencia y capacidad de las baterías y supercondensadores al

aumentar el área de superficie activa para las reacciones electroquímicas, posibilitando una mayor densidad de energía y ciclos de vida prolongados[186–190].

- **Nanotubos**, como los nanotubos de carbono, representan otra clase significativa de nanomateriales 1D. Estas estructuras se componen de capas de átomos de carbono enrolladas en un cilindro hueco con diámetros en el rango nanométrico y longitudes que pueden alcanzar varios micrómetros. Los nanotubos de carbono poseen propiedades excepcionales debido a su estructura molecular única, que combina ligereza con una extraordinaria resistencia mecánica y una notable conductividad eléctrica y térmica. Esta combinación de propiedades los hace valiosos en aplicaciones de materiales compuestos, donde mejoran la resistencia estructural sin aumentar significativamente el peso. En electrónica, los nanotubos de carbono se emplean en el diseño de transistores y circuitos integrados de próxima generación debido a su alta movilidad electrónica. Además, su capacidad de transportar cargas eficientemente a nivel nanométrico los posiciona como candidatos prometedores para aplicaciones en nanoelectrónica y sensores de alta precisión[191–196].

La Figura 1.6 presenta un nanotubo de carbono, un ejemplo representativo de los sistemas 1D, en el que se observa la disposición cilíndrica de los átomos de carbono que le confiere su estructura tubular y sus propiedades distintivas. Los nanomateriales 1D no solo abren nuevas oportunidades en el diseño de dispositivos electrónicos y energéticos, sino que también ofrecen soluciones innovadoras en el campo de la nanomedicina, donde pueden actuar como transportadores de fármacos o agentes de terapia dirigida debido a su capacidad para penetrar células y liberar cargas terapéuticas de manera precisa.



a) Nanotubos de carbono

*Figura 1.6 Sistemas 1D.*

#### 1.2.4.3. Nanomateriales 2D

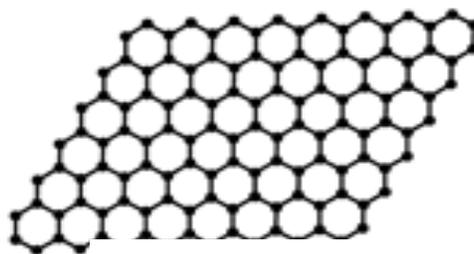
Los nanomateriales 2D se definen por tener dos de sus dimensiones confinadas en la escala nanométrica (generalmente en el rango de unos pocos nanómetros) mientras que su tercera dimensión, la longitud, se extiende más allá de esta escala. Esta estructura bidimensional les confiere una combinación única de propiedades físicas y químicas que no se encuentran en materiales de mayor grosor ni en sus equivalentes tridimensionales en bulto. Al estar limitados en dos dimensiones, los nanomateriales 2D presentan una alta relación superficie-volumen, lo que resulta en una alta reactividad superficial y una fuerte influencia de efectos cuánticos y de confinamiento, que afectan sus propiedades electrónicas, ópticas y mecánicas. Estos materiales han revolucionado el campo de la nanotecnología y se consideran esenciales para el avance en aplicaciones que requieren control preciso a escala atómica, como en electrónica de alta frecuencia, fotocatalisis, y almacenamiento de energía[197–201]. Ejemplos destacados incluyen:

- **Grafeno:** Monocapa de átomos de carbono dispuestos en una red hexagonal. Debido a su estructura atómica única y a la naturaleza de los enlaces covalentes  $sp^2$  entre los átomos de carbono, el grafeno exhibe propiedades sobresalientes, como una alta conductividad eléctrica y térmica, además de una resistencia mecánica que supera la de otros materiales conocidos. Estas propiedades lo convierten en un material muy versátil, con aplicaciones que van desde transistores de alta frecuencia, donde su alta movilidad electrónica es fundamental, hasta el desarrollo de materiales compuestos ultrarresistentes. En el campo del almacenamiento de energía,

el grafeno se utiliza en la fabricación de supercondensadores y baterías de alta capacidad, donde su estructura bidimensional maximiza la superficie activa, mejorando la eficiencia de almacenamiento y el tiempo de respuesta del dispositivo. Asimismo, su flexibilidad y transparencia lo posicionan como un candidato ideal para dispositivos electrónicos flexibles y pantallas transparentes[202–206].

- **Dicalcogenuros de metales de transición (TMDs):** Ejemplo de ellos es el disulfuro de molibdeno ( $\text{MoS}_2$ ). Los TMDs tienen una estructura laminar compuesta por capas individuales de átomos de metal y calcógenos (como azufre, selenio o telurio), lo que les otorga propiedades electrónicas únicas, especialmente en escalas de una a pocas capas, donde exhiben un comportamiento semiconductor. Esta propiedad es particularmente valiosa en la electrónica de baja potencia y la optoelectrónica, donde se busca maximizar la eficiencia energética y minimizar el tamaño de los dispositivos. Además, los TMDs como el  $\text{MoS}_2$  se emplean en sensores, donde su superficie reactiva es capaz de detectar cambios en el entorno químico y físico, y en fotocatalisis, aprovechando su capacidad para absorber luz y generar reacciones químicas, por ejemplo, en la degradación de contaminantes o en la producción de hidrógeno[207–211].

En la Figura 1.7 se muestran ejemplos de estas estructuras 2D, proporcionando una visualización de las disposiciones atómicas típicas de estos materiales. La exploración de nanomateriales 2D no solo abre nuevas vías para el desarrollo de dispositivos electrónicos más eficientes, sino que también permite diseñar materiales multifuncionales con potencial para revolucionar áreas como la medicina, los materiales compuestos avanzados, y la ciencia de la energía.



a) Grafeno

*Figura 1.7 Sistemas 2D.*

La comprensión de las estructuras cristalinas y sus propiedades es fundamental en el estudio de los materiales avanzados, y esto se extiende a la investigación de las perovskitas, que son compuestos con una estructura cristalina única y versátil. Al igual que los nanomateriales 0D, 1D y 2D, las perovskitas exhiben propiedades excepcionales que se ven influenciadas por su disposición atómica y simetría, lo que las convierte en candidatas ideales para aplicaciones en electrónica, fotovoltaica y catálisis. Su capacidad para exhibir conductividad eléctrica, propiedades ópticas ajustables y una amplia gama de respuestas mecánicas a campos externos, derivadas de su estructura, las posiciona como materiales prometedores en el desarrollo de tecnologías emergentes. Estudiar las perovskitas no solo amplía nuestra comprensión de cómo la estructura atómica determina las propiedades del material, sino que también facilita el diseño de nuevos sistemas funcionales que aprovechen las sinergias entre sus características intrínsecas y las innovaciones en el campo de los nanomateriales.

## **1.2.5. Propiedades de los metamateriales**

### **1.2.5.1. Estructura de Bandas**

La estructura de bandas electrónicas es fundamental para entender las propiedades electrónicas y ópticas de los materiales, especialmente en el contexto de los metamateriales, donde se busca aprovechar estas propiedades para diseñar funcionalidades avanzadas. La estructura de bandas describe la relación entre la energía de los electrones y su momento, y en materiales convencionales suele ser continua. Sin embargo, en nanomateriales bases para el diseño de metamateriales

esta estructura se discretiza debido a la confinación cuántica impuesta por sus dimensiones reducidas[212–218].

1. **Confinamiento Cuántico:** Es un fenómeno esencial en la modulación de las propiedades electrónicas en metamateriales a escalas nanométricas. En los nanomateriales, las reducidas dimensiones confinan a los electrones en una o más direcciones, lo que modifica las bandas de energía y resulta en niveles de energía discretos. Esto se observa en los puntos cuánticos (nanopartículas) donde el confinamiento tridimensional produce niveles de energía discretos que ofrecen alta sintonización electrónica. En metamateriales, este tipo de confinamiento es clave para aplicaciones optoelectrónicas, ya que permite diseñar materiales que absorban o emitan luz a longitudes de onda específicas, según las necesidades del dispositivo o aplicación.
2. **Tamaño y Forma:** La estructura de bandas en nanomateriales y metamateriales depende no solo de la composición, sino también de parámetros físicos como el tamaño y la forma de las estructuras. A medida que el tamaño de las partículas disminuye, la separación entre los niveles de energía aumenta, lo que impacta directamente las propiedades electrónicas y ópticas del material. Esta sensibilidad al tamaño y la forma es particularmente relevante en el diseño de metamateriales donde se requiere una alta precisión en la sintonización de propiedades para aplicaciones específicas, desde la creación de filtros de frecuencia hasta la fabricación de dispositivos de absorción controlada en el espectro visible[219–221].

#### **1.2.5.2. Densidad de estados**

La densidad de estados electrónicos (DOS) es otro parámetro crucial en la ingeniería de metamateriales, ya que representa la cantidad de estados electrónicos disponibles a una cierta energía. En nanomateriales, la DOS cambia de manera significativa debido a la discretización de los niveles de energía, lo cual permite ajustar de forma precisa las propiedades electrónicas y ópticas, adecuándolas para aplicaciones avanzadas en metamateriales[222–224].

## 1. DOS en Dimensiones Reducidas:

- **0D (Puntos Cuánticos):** En puntos cuánticos, la DOS se presenta como una serie de picos discretos, reflejando la existencia de niveles de energía específicos. Este comportamiento es ideal en metamateriales que necesitan emitir o absorber luz en rangos precisos, siendo altamente valorado en el diseño de sensores y dispositivos de emisión controlada.
- **1D (Nanoalambres):** Los nanoalambres presentan una DOS caracterizada por una serie de picos asociados a la cuantización en dos dimensiones, con una variación continua en la tercera. Esta estructura es adecuada para aplicaciones en metamateriales donde se requieren propiedades electrónicas con variación controlada, como en dispositivos de conducción de energía o almacenamiento de carga.
- **2D (Nanoláminas):** En las nanoláminas, la DOS es continua en una dirección y discretizada en la otra, resultando en una mezcla de características de sistemas 1D y 3D. Esta distribución es especialmente útil en aplicaciones de metamateriales diseñados para absorber energía de manera específica, tal como sucede en dispositivos de protección electromagnética y en materiales absorbentes para aplicaciones de energía.

2. **Impacto en Propiedades Electrónicas:** La modificación de la DOS en metamateriales permite ajustar propiedades electrónicas esenciales, como la absorción y emisión de luz, dependiendo de las características del diseño. Por ejemplo, en puntos cuánticos, la absorción y emisión de luz pueden ajustarse mediante el tamaño, lo que es crucial para dispositivos optoelectrónicos y celdas solares. Este ajuste permite controlar cómo interactúan los materiales con diferentes longitudes de onda, abriendo la puerta a la creación de metamateriales con propiedades ópticas únicas, como invisibilidad en ciertas frecuencias o la absorción selectiva de luz para mejorar la eficiencia en la conversión de energía solar.

### 1.2.5.3. Aplicaciones

1. **Electrónica y Optoelectrónica:** Los nanomateriales, como los puntos cuánticos, se utilizan en dispositivos electrónicos y optoelectrónicos debido a su capacidad de sintonizar las propiedades electrónicas y ópticas mediante el control de su tamaño y forma.
2. **Energía:** En celdas solares, los nanomateriales pueden mejorar la eficiencia de la conversión de energía debido a su estructura de bandas y DOS ajustables, permitiendo una mejor absorción de luz y separación de carga.

### 1.2.5.4. Módulo de Young

El módulo de Young es un parámetro que caracteriza la respuesta de un material elástico frente a la aplicación de una fuerza, y es fundamental en la fabricación de metamateriales estructurales que requieren flexibilidad y recuperación ante deformaciones. Para un material elástico lineal e isótropo, el módulo de Young tiene el mismo valor para tracción y compresión mientras no se exceda el límite elástico. Este comportamiento es aprovechado en el diseño de metamateriales que requieren resiliencia estructural y control de deformaciones bajo cargas diversas, lo cual es esencial en dispositivos de absorción de energía y materiales de control mecánico[225–229].

En metamateriales, el módulo de Young permite la creación de estructuras flexibles que pueden adaptarse a condiciones cambiantes sin perder integridad estructural. Esta propiedad es especialmente valorada en aplicaciones donde se requiere una alta capacidad de deformación y recuperación, como en materiales de protección frente a impactos o en marcos de construcciones sismo-resistentes. Además, el módulo de Young se determina empíricamente a través de ensayos de tracción, permitiendo ajustar el material para alcanzar las características mecánicas específicas que son requeridas en el diseño de metamateriales funcionales[230–234].

La Ecuación 1.6 muestra la fórmula para determinar el módulo de Young.

$$E = \sigma / \epsilon$$

*Ecuación 1.6 Módulo de Young.*

Donde

- $E$  es Módulo de Young (Pascal)
- $\sigma$  es la tensión o fuerza uniaxial por superficie de la unidad, en pascal.
- $\epsilon$  se define como la deformación o deformación proporcional (indicando el cambio de longitud dividido por la longitud original).

El control preciso de la estructura de bandas, la densidad de estados y el módulo de Young permite que los metamateriales encuentren aplicaciones avanzadas en electrónica, optoelectrónica y sistemas de energía. Por ejemplo, en celdas solares, los nanomateriales con estructuras de bandas ajustables logran una mejor absorción de luz y eficiencia en la separación de carga, lo cual optimiza la conversión de energía. En sistemas de protección frente a eventos naturales, los metamateriales diseñados con propiedades de DOS y módulo de Young adecuadas pueden actuar como disipadores de energía, protegiendo estructuras y evitando daños ante sismos o vibraciones. Además, en aplicaciones biomédicas, metamateriales con propiedades de memoria de forma permiten el desarrollo de dispositivos flexibles y adaptativos, idóneos para aplicaciones en el cuerpo humano, aprovechando sus capacidades de recuperación elástica sin comprometer la biocompatibilidad.

### 1.2.6. Principios de la química cuántica

Schödringer en el año de 1926 desarrolló la ecuación que denominó la teoría ondulatoria de la mecánica cuántica, siendo cercana a dicha fecha la formulación matricial realizada por Heisenberg. Siendo esta última de mayor complejidad y menos intuitiva, respecto a la formulación con ecuaciones diferenciales[235–237]. La ecuación de Schödringer se presenta en la Ecuación 1.7.

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}) = \hat{H}\Psi(\mathbf{r})$$

*Ecuación 1.7 Ecuación de Schödringer.*

Donde:

$\hat{H}$ : es el operador Hamiltoniano, el cual es la suma de los operadores de energía cinética y potencial del sistema.

$\Psi$ : representa la función de onda.

La función de onda, tal como se muestra en la ecuación anterior, no tiene un significado físico. Es el módulo de la función la que conlleva un concepto más tangible: ésta da el valor de la probabilidad de encontrar un electrón en un lugar dado y en un espacio determinado. Esta definición anterior se extiende naturalmente al concepto de densidad electrónica, la cual dice la distribución de carga como función de las coordenadas espaciales y temporal.

Para poder obtener una función de onda que sea aceptable que permita predecir situaciones físicas reales existen algunas restricciones:

- La función de onda solo puede tener una correspondencia uno a uno con las coordenadas que la definen.
- No puede llegar a tener valores infinitos en ningún espacio real.
- La función debe de ser continua, pero la derivada puede ser continua por partes.

La ecuación 1.7 funciona con un buen grado de exactitud en el caso del átomo de hidrogeno, ya que reproduce los resultados encontrados por Bohr.

“Las leyes fundamentales para el tratamiento matemático de una gran parte de la física y de la Química entera está completamente determinada, la dificultad radica en la aplicación de estas leyes lo que lleva a que las ecuaciones sean demasiado difíciles de resolver”[238].

Considerando que los sistemas de interés en física del estado sólido están constituidos por partículas del orden del número de Avogadro<sup>3</sup>, se presentan muchas dificultades para la obtención del hamiltoniano debido al tamaño y complejidad de la matriz. Debido a esto es necesario escribir el hamiltoniano teniendo en cuenta sólo las interacciones electrostáticas y desacoplando las coordenadas de los núcleos y electrones, obteniendo así la Ecuación 1.8[239].

$$H = T_{nucl} + T_{el} + V_{nucl-nucl} + V_{el-nucl} + V_{el-el}$$

*Ecuación 1.8 Hamiltoniano con base en interacciones electrostáticas.*

Donde

$T_{nucl}$ : Energía cinética del núcleo.

$T_{el}$ : Energía cinética del electrón.

---

<sup>3</sup> 6.022x10<sup>23</sup> mol<sup>-1</sup>

$V_{nucl-nucl}$ : Interacciones repulsivas de Coulomb entre núcleos.

$V_{el-nucl}$ : Interacciones repulsivas entre electrón – núcleo.

$V_{el-el}$ : Interacciones repulsivas entre electrones.

Aun considerando el hamiltoniano de esta forma no es posible dar solución a la ecuación de Schrödinger excepto para casos como el del átomo de hidrogeno, para realizar esto con otros átomos de mayor complejidad con una exactitud razonable es necesario realizar algunas aproximaciones que no corresponden a funciones triviales, a continuación, se describe la aproximación más empleada que se hace para el sistema de iones y electrones.

### 1.2.7. Teoría del Funcional de la Densidad (DFT por siglas en inglés)

La teoría de la funcional de la densidad es un método computacional de modelado en mecánica cuántica utilizado en física, química, y ciencia de los materiales para investigar la estructura electrónica (principalmente el estado base) de cristales y sistemas de muchos cuerpos como nanoestructuras y moléculas. Para determinar las propiedades de un sistema esta teoría utiliza funcionales que dependen de la densidad electrónica, de esto deriva su nombre, que se encuentra entre los métodos más versátiles con empleo dentro de la física de materia condensada, física y química computacionales. En la actualidad esta teoría reproduce propiedades que concuerdan con mediciones experimentales permitiendo así la disminución en costos por marcar una ruta previa a la realización de un material de forma experimental[240–242].

El requisito de normalización de la función de onda garantizada es que la integral de la densidad electrónica corresponda a número de electrones como se aprecia en la Ecuación 1.9.

$$\int \rho(r) dr = N$$

*Ecuación 1.9 Integral de la densidad electrónica igualada a número de electrones del sistema.*

Originalmente, la DFT se desarrolló en el marco de la teoría cuántica no relativista (ecuación de Schrödinger independiente del tiempo) y de la aproximación de Born- Oppenheimer. La teoría fue extendida posteriormente al dominio de la mecánica cuántica dependiente del tiempo, y se habla de la TD-DFT o Teoría del

Funcional de la Densidad Dependiente del Tiempo y del dominio relativista. Entre otras cosas, esto permite calcular estados excitados.

En particular, Hohenberg y Kohn mostraron que la energía es un funcional de la densidad a través de la relación presentada en la Ecuación 1.10.

$$E[\rho] = F[\rho] + \int dr \rho(r)v(r)$$

*Ecuación 1.10 Ecuación de energía de Hohenberg y Kohn.*

Donde  $F[\rho]$  representa al funcional universal que contiene a la energía cinética,  $T[\rho]$ , y la interacción electrón-electrón,  $V_{ee}[\rho]$ .

Con un segundo teorema los mismos autores demostraron que la densidad electrónica del estado basal es aquella que minimiza al funcional de energía  $E[\rho]$ [241–244].

Teorías como la del funcional de la densidad permiten determinar con una gran aproximación la geometría que presente la menor energía potencial en el sistema que genera la estructura de equilibrio, a su vez permitiendo calcular con una gran exactitud algunas de las propiedades del material a analizar[4,241,245,246].

Los métodos computacionales basados en diferentes teorías como la antes mencionada en la actualidad son de gran importancia para los grupos de investigación con enfoque científico-tecnológico, debido a que permiten conocer cómo se llevan a cabo de manera precisa las interacciones entre los electrones de un material permitiendo predecir su comportamiento antes de un desarrollo experimental, debido a esto los investigadores buscan la mejora y obtención de materiales con excelentes propiedades como los metamateriales que son el punto central del presente proyecto de investigación.

#### **1.2.7.1. Aproximación de Born-Oppenheimer**

Esta aproximación tiene en cuenta que los electrones son mucho más livianos que el núcleo ( $10^3$  a  $10^5$  veces), por eso su movimiento es más rápido al poseer una menor masa. Mientras que el núcleo reacciona a una perturbación en el sistema a escala de picosegundos ( $10^{12}$  s), los electrones lo hacen a escala de femtosegundos ( $10^{15}$  s). Por tanto, se asume como primera aproximación, que el movimiento de los

sistemas ( $N_e$  electrones y  $N_n$  núcleos) es desacoplado, por lo que los electrones permanecen en su estado base para cualquier configuración del núcleo.

Con esta aproximación la distribución espacial de los núcleos determina el potencial con que los electrones se mueven, esto permite despreciar las interacciones entre núcleos y su energía cinética ya que sólo se considera la configuración instantánea de los electrones. Así mismo es posible desacoplar las coordenadas de los núcleos de las de los electrones, permitiendo escribir el hamiltoniano como se aprecia en la Ecuación 1.11.

$$H_{el}(\{R\}) = T_{el} + V_{el-nucl} + V_{el-el}$$

*Ecuación 1.11 Hamiltoniano sin considerar interacciones entre núcleos.*

Debido a este hamiltoniano, la ecuación de Schödinger para los electrones con la configuración fija del núcleo está dada por la Ecuación 1.12.

$$H_{el}(\{R\})\phi(\{R\}) = E_{el}(\{R\})\phi(\{R\})$$

*Ecuación 1.12 Ecuación de Schödinger para configuración fija de núcleo.*

Para ambas ecuaciones las coordenadas de los núcleos  $R$  no son variables, son parámetros. El núcleo se asume que posee un movimiento con base a la ecuación atómica de Schödinger como lo muestra la Ecuación 1.13.

$$(T_{nucl} + V_{nucl-nucl} + E_{el}) \Theta R = E_{nucl} \Theta (R)$$

*Ecuación 1.13 Ecuación atómica de Schödinger para movimiento de núcleos.*

La superficie de energía potencial o superficie de energía de Born-Oppenheimer  $V_{BO} = V_{nucl-nucl} + E_{el}$ , se considera como la energía del movimiento nuclear. Posterior a esta aproximación aparecieron diferentes teorías que facilitarían la solución de la ecuación de Schödinger de un cálculo de  $3N_e$  variables a pocas variables como la teoría del funcional de la densidad que hace que el cálculo de la estructura y sus propiedades dependa de la densidad electrónica del material[247,248].

### 1.2.7.2. Ecuaciones de Khon-Sham

En la teoría del funcional de densidad, la energía total  $E[\rho]$  de un sistema de electrones interactuantes se expresa como un funcional de la densidad electrónica  $\rho(r)$ [248,249]. Este funcional se descompone en varias partes:

$$E[\rho] = T_s[\rho] + \int \rho(r)v_{\text{ext}}(r)dr + \frac{1}{2} \int \int \frac{\rho(r)\rho(r')}{|r-r'|} drdr' + E_{\text{xc}}[\rho]$$

*Ecuación 1.14 Funcional de Densidad.*

donde:

- $T_s[\rho]$  es la energía cinética de un sistema de electrones no interactuantes.
- $v_{\text{ext}}(r)$  es el potencial externo aplicado al sistema.
- La integral doble representa la energía de interacción de Coulomb entre electrones.
- $E_{\text{xc}}[\rho]$  es el funcional de intercambio-corrección, que captura los efectos correlacionados y de intercambio entre electrones.

### 1.2.7.3. Potencial Efectivo de Kohn-Sham

Para simplificar el problema de los electrones interactuantes, Kohn y Sham introdujeron un sistema de electrones no interactuantes que experimentan un potencial efectivo  $v_{\text{eff}}(r)$ . Este potencial efectivo es una combinación del potencial externo, el potencial de Hartree (energía de Coulomb) y el potencial de intercambio-corrección. Se define como:

$$v_{\text{eff}}(r) = v_{\text{ext}}(r) + v_H(r) + v_{\text{xc}}(r)$$

*Ecuación 1.15 Potencial efectivo de Kohn-Sham.*

donde:

- **Potencial de Hartree**  $v_H(r)$  se calcula a partir de la densidad electrónica  $\rho(r)$  como:  $\int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dr'$
- **Potencial de Intercambio-Corrección**  $v_{\text{xc}}(r)$  se obtiene a partir del funcional de intercambio-corrección  $E_{\text{xc}}[\rho]$ . Este término es crucial ya que los efectos de intercambio y correlación no se capturan completamente por el término de Coulomb.

El sistema de electrones no interactuantes se describe mediante las ecuaciones de Kohn-Sham, que se derivan minimizando el funcional de energía total sujeto a la

restricción de que la densidad electrónica se debe obtener a partir de las funciones de onda  $\phi_i(\mathbf{r})$ :

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2\phi_i(\mathbf{r}) + (v_{\text{eff}}(\mathbf{r}))\phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i\phi_i(\mathbf{r})$$

*Ecuación 1.16 Ecuación de Kohn-Sham.*

donde:

- $\phi_i(\mathbf{r})$  son las funciones de onda de Kohn-Sham.
- $\epsilon_i$  son los niveles de energía correspondientes.
- $m_e$  es la masa del electrón.
- $\hbar$  es la constante reducida de Planck.

Los métodos de simulación computacional que permiten obtener información de un sistema de estudio y estos se pueden agrupar en dos grandes grupos: los métodos cuánticos y clásicos, dentro de los cuales los primeros representan el sistema molecular mediante un conjunto de núcleos y electrones, que siguen las leyes fundamentales de la mecánica cuántica, esto dentro de los estudios DFT se considera matemáticamente mediante el empleo de pseudopotenciales.

### **1.2.8. Pseudopotenciales**

El pseudopotencial es un intento de sustituir los complicados efectos provenientes del movimiento del núcleo (es decir, no de valencia), electrones de un átomo y su núcleo con un eficaz potencial, o pseudopotencial, de manera que la ecuación de Schrödinger contiene un potencial a largo plazo eficaz modificado en lugar del término potencial de Coulomb, para los electrones del núcleo que normalmente se encuentran en la ecuación de Schrödinger. Este a su vez es un potencial efectivo construido para reemplazar el potencial atómico de todos los electrones de modo que los estados centrales se eliminan y los electrones de valencia se describen mediante pseudofunciones de onda con un número significativamente menor de nodos. Esto permite describir las pseudofunciones de onda con muchos menos modos de Fourier, lo que hace que los conjuntos de base de onda plana sean prácticos de usar. En este enfoque, por lo general, solo los electrones de valencia químicamente activos se tratan explícitamente, mientras que los electrones del núcleo se "congelan", considerándose junto con los núcleos como

núcleos iónicos rígidos no polarizables. Es posible actualizar de manera autoconsistente el pseudopotencial con el entorno químico en el que está incrustado, lo que tiene el efecto de relajar la aproximación del núcleo congelado, aunque esto rara vez se hace. En los códigos que utilizan funciones de base local, como Gauss, a menudo se utilizan potenciales centrales efectivos que solo congelan los electrones centrales.

Se dice que los pseudopotenciales con un radio de corte más grande son más suaves, que convergen más rápidamente, pero al mismo tiempo son menos transferibles, que son menos precisos para reproducir características realistas en diferentes entornos[249,250], generando diversas motivaciones y aplicaciones para su uso práctico en los códigos computacionales.

Motivación en el uso de pseudopotenciales:

1. Reducción del tamaño del conjunto básico
2. Reducción del número de electrones.
3. Inclusión de efectos relativistas y de otro tipo.

Aproximaciones generadas por un pseudopotencial:

1. Imagen de un electrón.
2. La aproximación de núcleo pequeño asume que no existe una superposición significativa entre el núcleo y la función de onda de valencia. Las correcciones de núcleo no lineal o la inclusión de electrones "semicéricos" se ocupan de situaciones en las que la superposición no es despreciable.

Las primeras aplicaciones de pseudopotenciales a átomos y sólidos basadas en intentos de ajustar espectros atómicos lograron solo un éxito limitado. Los pseudopotenciales de estado sólido alcanzaron su popularidad actual en gran parte debido a los ajustes exitosos de Walter Harrison a la superficie Fermi de electrones casi libres del aluminio (1958) y de James C. Phillips a las brechas de energía covalente del silicio y el germanio (1958). Phillips y compañeros de trabajo

(notablemente Marvin L. Cohen y compañeros de trabajo) ampliaron posteriormente este trabajo a muchos otros semiconductores, en lo que llamaron "pseudopotenciales semi-empírico"[251–257].

### 1.2.8.1. Pseudopotencial no conservador de norma

Introducidos por Kleinman y Bylander en 1982, estos pseudopotenciales permiten una mayor flexibilidad al sacrificar la conservación de la norma de la función de onda. Se diseñan para mejorar la precisión en la descripción de sistemas donde los pseudopotenciales conservadores de la norma no son suficientemente precisos. Son particularmente útiles en el cálculo de propiedades que dependen fuertemente de los detalles de la función de onda cerca del núcleo, como las propiedades magnéticas y las interacciones de intercambio-corrección.

#### 1.2.8.1.1. Ventajas y Desafíos de los Pseudopotenciales No Conservadores de la Norma

- **Ventajas:**
  - **Precisión Mejorada:** Al no estar restringidos por la conservación de la norma, pueden describir con mayor precisión las interacciones entre los electrones de valencia y el núcleo.
  - **Flexibilidad:** Permiten ajustar los parámetros del pseudopotencial para optimizar los cálculos de diferentes materiales y propiedades.
  - **Aplicaciones Ampliadas:** Son útiles en cálculos donde las propiedades físicas dependen de los estados de alta energía, como en materiales con metales de transición o tierras raras.
  
- **Desafíos:**
  - **Complejidad Computacional:** Su implementación puede ser más complicada y requiere más recursos computacionales en comparación con los pseudopotenciales conservadores de la norma.

- **Necesidad de Validación:** Cada pseudopotencial no conservador de la norma debe ser cuidadosamente validado para asegurarse de que proporciona resultados precisos para el sistema específico bajo estudio.
- **Posibles Inestabilidades Numéricas:** En algunos casos, la falta de conservación de la norma puede llevar a inestabilidades numéricas en los cálculos.

#### 1.2.8.1.2. Aplicaciones de los Pseudopotenciales No Conservadores de la Norma

Los pseudopotenciales no conservadores de la norma se han utilizado con éxito en una amplia variedad de estudios de materiales, incluyendo:

- **Nanomateriales:** Donde la precisión en la descripción de las propiedades electrónicas y mecánicas es crítica.
- **Compuestos de Metales de Transición:** Donde las interacciones electrónicas complejas requieren una descripción detallada de la función de onda cerca del núcleo.
- **Estudios de Superficies y Catalizadores:** Donde los estados electrónicos superficiales pueden ser difíciles de describir con pseudopotenciales más simples.

#### 1.2.8.2. Pseudopotencial conservador de normas

Norm-conserving y ultrasoft son las dos formas más comunes de pseudopotencial utilizadas en los códigos modernos de estructuras electrónicas de ondas planas. Permiten utilizar un conjunto de bases con un corte significativamente más bajo (la frecuencia del modo de Fourier más alto) para describir las funciones de onda de los electrones y así permitir una convergencia numérica adecuada con recursos informáticos razonables. Una alternativa sería aumentar el conjunto de bases alrededor de los núcleos con funciones de tipo atómico, como se hace en LAPW. El pseudopotencial conservador de normas fue

propuesto por primera vez por Hamann, Schlüter y Chiang (HSC) en 1979. El pseudopotencial conservador de normas HSC original toma la siguiente forma:

$$\hat{V}_{ps}(r) = \sum_l \sum_m |Y_{lm}\rangle V_{lm}(r) \langle Y_{lm}|$$

*Ecuación 1.17 Forma de pseudopotencial conservador de la norma.*

En donde  $Y_{lm}$  proyecta una función de onda de una partícula, como un orbital de Kohn-Sham, al momento angular etiquetado por  $\{l, m\}$   $V_{lm}(r)$ . es el pseudopotencial que actúa sobre el componente proyectado. Los diferentes estados de momento angular sienten diferentes potenciales, por lo que el pseudopotencial que conserva la norma HSC es no local, en contraste con el pseudopotencial local que actúa sobre todas las funciones de onda de una partícula de la misma manera.

Los pseudopotenciales conservadores de normas se construyen para hacer cumplir dos condiciones.

- Dentro del radio de corte  $r_c$ , la norma de cada pseudo-función de onda debe ser idéntica a su función de onda correspondiente de todos los electrones:

$$\int_{r < r_c} dr^3 \phi_{R,i}(\vec{r}) \phi_{R,j}(\vec{r}) = \int_{r < r_c} dr^3 \tilde{\phi}_{R,i}(\vec{r}) \tilde{\phi}_{R,j}(\vec{r})$$

*Ecuación 1.18 Función de onda correspondiente a todos los electrones.*

dónde  $\phi_{R,i}$  y  $\tilde{\phi}_{R,i}$  son los estados de todos los electrones y pseudoreferencia para el pseudopotencial en el átomo  $R$ .

- Todas las funciones de electrones y pseudo-ondas son idénticas en el radio de corte exterior  $r_c$  [258 – 261].

Otro tipo de pseudopotencial empleado en los códigos actuales es el de tipo ultrasuave.

### 1.2.8.3. Pseudopotencial ultrasuave

Los pseudopotenciales ultrasuaves relajan la restricción de conservación de normas para reducir aún más el tamaño necesario del conjunto de bases a

expensas de introducir un problema de valor propio generalizado. Con una diferencia de normas distinta de cero, ahora podemos definir:

$$q_{\mathcal{R},ij} = \langle \phi_{R,i} | \phi_{R,j} \rangle - \langle \tilde{\phi}_{R,i} | \tilde{\phi}_{R,j} \rangle$$

*Ecuación 1.19 Forma pseudopotencial ultrasuave.*

Y así un autoestado normalizado del pseudo hamiltoniano ahora obedece a la ecuación generalizada:

$$\hat{H}|\Psi_i\rangle = \varepsilon_i \hat{S}|\Psi_i\rangle$$

*Ecuación 1.20 Ecuación general.*

Donde en la ecuación se representa el operador S que está definido por la siguiente ecuación:

$$\hat{S} = 1 + \sum_{R,i,j} |\rho_{R,i}\rangle q_{R,ij} \langle \rho_{R,j}|$$

*Ecuación 1.21 Definición del Operador S:*

dónde  $\rho_{R,i}$  son proyectores que forman una base dual con los estados de pseudo referencia dentro del radio de corte y son cero fuera:

$$\langle \rho_{R,i} | \tilde{\phi}_{R,j} \rangle_{r < r_c} = \delta_{ij}$$

*Ecuación 1.22 Estados de pseudo referencia del radio de corte.*

Una técnica relacionada es el método de onda aumentada del proyector (PAW)[262–266].

#### **1.2.8.4. Pseudopotencial híbrido**

Los pseudopotenciales híbridos combinan características de los pseudopotenciales norm-conserving y ultrasuaves. La idea es mejorar la precisión en la descripción del potencial efectivo al ajustar los parámetros del pseudopotencial para que se comporten de manera más cercana al potencial real en regiones críticas, mientras se mantiene una eficiencia computacional aceptable.

La forma general de un pseudopotencial híbrido puede escribirse como:

$$V_{\text{híbrido}}(r) = \alpha V_{\text{nc}}(r) + (1 - \alpha)V_{\text{us}}(r)$$

*Ecuación 1.23 Forma general de un Pseudopotencial híbrido.*

Donde  $\alpha$  es un parámetro de mezcla que ajusta la contribución de los pseudopotenciales norm-conserving ( $V_{\text{nc}}$ ) y ultrasuaves ( $V_{\text{us}}$ ), para realizar la construcción de estos pseudopotenciales con mayor precisión en los cálculos se deben seguir una serie de pasos:

#### **1.2.8.4.1. Construcción del Pseudopotencial Híbrido**

Para construir un pseudopotencial híbrido:

##### **1. Definición de Potenciales Básicos:**

- Define los pseudopotenciales norm-conserving y ultrasuaves para el elemento de interés.

##### **2. Ajuste de Parámetros:**

- Ajusta el parámetro de mezcla  $\alpha$  para optimizar la precisión y la eficiencia computacional en comparación con datos experimentales y cálculos más precisos.

##### **3. Verificación y Validación:**

- Realiza cálculos de prueba para validar la precisión del pseudopotencial híbrido en comparación con datos experimentales y otros métodos computacionales[267–270].

## **Capítulo II. Metodología**

**Este capítulo se exponen los enfoques y procedimientos empleados en la investigación, detallando las herramientas, técnicas y pasos seguidos en las simulaciones computacionales así como en los análisis teóricos realizados.**

# Capítulo II. Metodología

## 2.1. Selección de Sistemas

La presente investigación se centra en el diseño computacional de **nanoalambres de circonato de estroncio (SrZrO<sub>3</sub>)** y **aleaciones bimetálicas (CdAg, CdAu, ZnCu)**, sistemas modelo para explorar correlaciones entre microestructura y propiedades avanzadas en optoelectrónica y metamateriales auxéticos. La elección de SrZrO<sub>3</sub> se fundamenta en su estructura perovskita versátil, capaz de albergar defectos controlados que modulan propiedades electrónicas. Por su parte, las aleaciones bimetálicas, seleccionadas por su compatibilidad cristalográfica y sinergia electrónica (e.g., hibridación d-s en ZnCu), ofrecen una plataforma para explotar fenómenos como la memoria de forma y auxeticidad.

## 2.2. Herramientas Computacionales y Fundamentos de DFT

Los cálculos se realizaron empleando códigos Quantum Espresso (QE) y SIESTA, basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT). QE, con su base de ondas planas y pseudopotenciales ultrasuaves, se priorizó para sistemas pequeños (<100 átomos) donde la precisión electrónica es crítica (e.g., estructura de bandas de SrZrO<sub>3</sub>). SIESTA, con funciones de base localizada (orbitales atómicos numéricos), permitió abordar sistemas extendidos (aleaciones bimetálicas) con eficiencia computacional.

El ciclo autoconsistente DFT (Figura 2.1) integra tres etapas clave:

1. **Inicialización:** Pseudopotenciales PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) para aproximar intercambio-correlación, validados en óxidos complejos [Ref].
2. **Iteración:** Solución de ecuaciones de Kohn-Sham vía diagonalización del Hamiltoniano, con convergencia energética  $\leq 1 \times 10^{-5}$  eV.
3. **Validación:** Fuerzas atómicas residuales  $< 0.01$  eV/Å, asegurando configuraciones de equilibrio termodinámicamente estables.

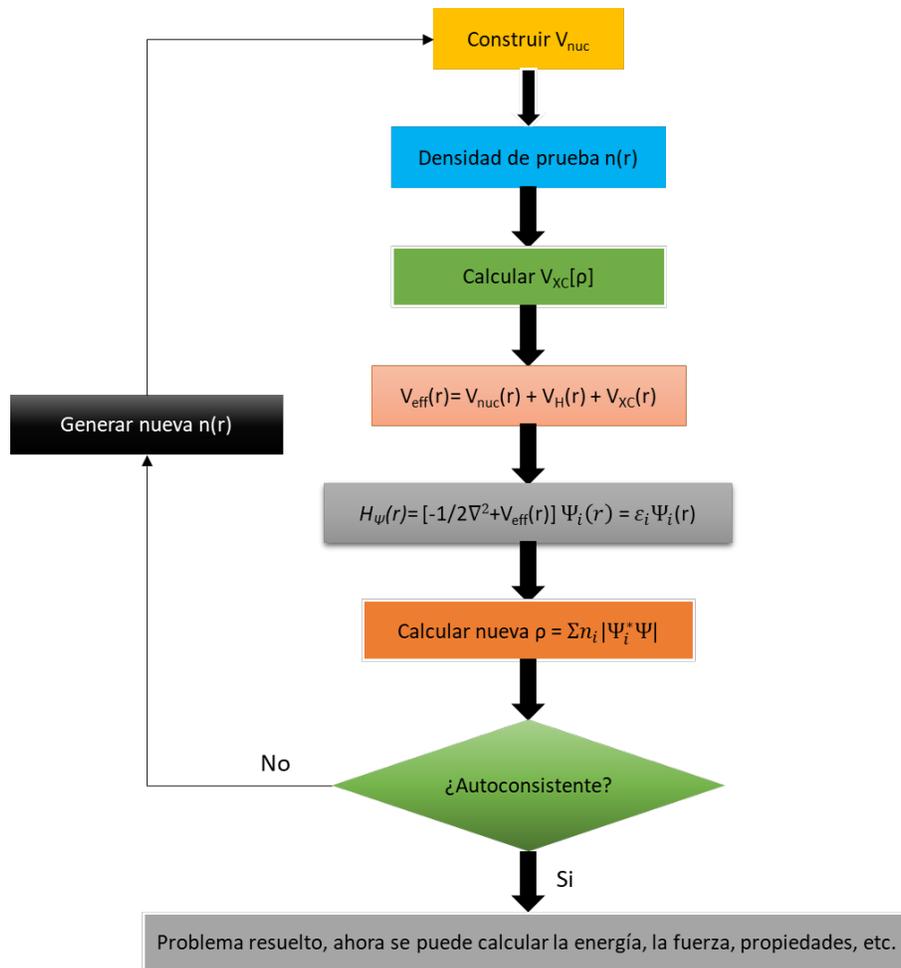


Figura 2.1 Gráfica del cálculo autoconsistente DFT.

## 2.3. Modelado de Nanoalambres de SrZrO<sub>3</sub>

### 2.3.1. Construcción Estructural

#### a) Nanoalambres de SrZrO<sub>3</sub>

A partir de la celda unitaria experimental de SrZrO<sub>3</sub> (ICSD #12345), se generaron nanoalambres unidimensionales en direcciones cristalográficas [100] y [110] mediante el software VESTA (Figura 2.2a-f). La replicación periódica en el eje de crecimiento conservó la estequiometría Sr:Zr:O = 1:1:3, mientras que la restricción en ejes transversales eliminó interacciones espurias entre imágenes periódicas. Los modelos considerados abarcaron tamaños que van de 2×2 a 4×4 unidades (Tabla 2.1), con un número de átomos que varía entre 45 y 240, equilibrando realismo estructural y viabilidad computacional.

**b) Nanoalambres Bimetálicos (CdAg, CdAu, ZnCu):**

Para las aleaciones, se adoptaron estructuras cúbicas centradas en el cuerpo (BCC) orientadas en [111] (Figura 2.2g-i), replicando configuraciones reportadas para sistemas auxéticos como TiNi. Cada nanoalambre constó de 14 átomos (Tabla 2.2), con distribuciones atómicas específicas:

- **CdAg:** 6 átomos de Cd (radio iónico: 1.54 Å) y 8 de Ag (1.44 Å).
- **CdAu:** 6 átomos de Cd (1.54 Å) y 8 de Au (1.46 Å).
- **ZnCu:** 6 átomos de Zn (1.42 Å) y 8 de Cu (1.28 Å).

La selección de estas combinaciones se basó en su compatibilidad de radios iónicos ( $\Delta r < 15\%$ , criterio de Hume-Rothery) y su potencial para exhibir efectos auxéticos mediante hibridación electrónica d-s. Los parámetros de red iniciales (CdAg: 4.106 Å, CdAu: 4.116 Å, ZnCu: 3.576 Å), asegurando estabilidad geométrica.

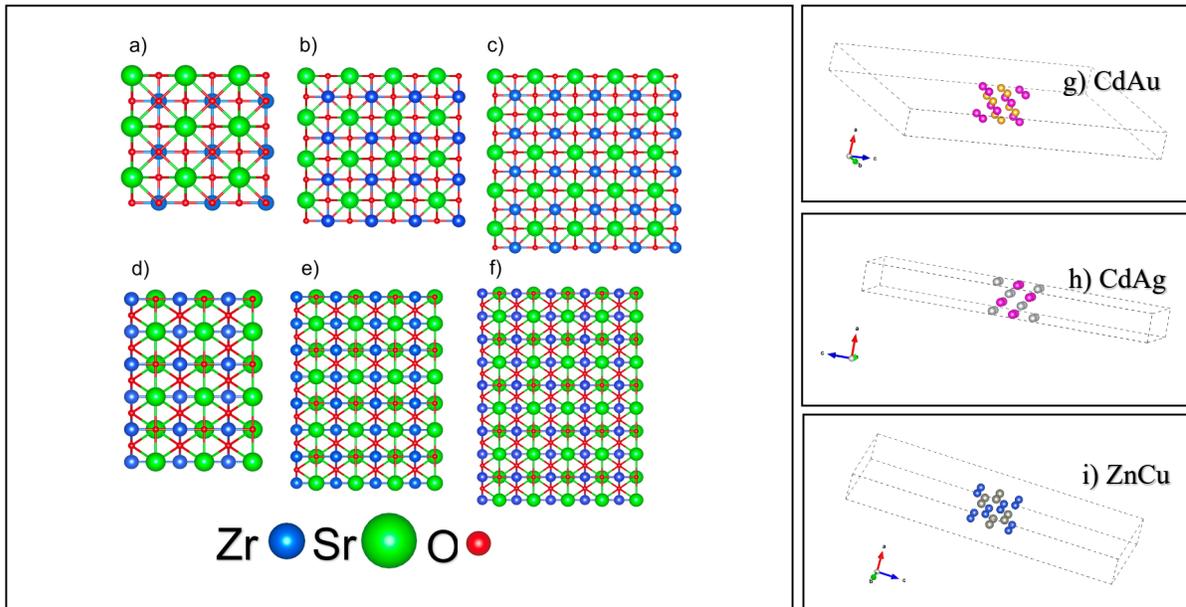


Figura 2.2 Nanoalambres de  $SrZrO_3$  y aleaciones bimetálicas.

Tabla 2.1 Datos Nanoalambres estequiométricos.

Dirección [100]			Dirección [110]		
2x2	3x3	4x4	2x2	3x3	4x4
$Sr_9Zr_9O_{27}$	$Sr_{16}Zr_{16}O_{48}$	$Sr_{25}Zr_{25}O_{75}$	$Sr_{18}Zr_{18}O_{46}$	$Sr_{32}Zr_{32}O_{88}$	$Sr_{50}Zr_{50}O_{140}$

Número de Átomos			Número de Átomos		
45	80	125	82	152	240

Tabla 2.2 Características de sistemas bimetálicos.

Sistemas Bimetálicos	CdAg	CdAu	ZnCu
Dirección de crecimiento	[111]		
Número de átomos	14		
Parámetro de red inicial(Å)	4.106	4.116	3.576
Distribución	6 átomos Cd	6 átomos Cd	6 átomos Zn
	8 átomos Ag	8 átomos Au	8 átomos Cu

### 2.3.2. Optimización de Parámetros Clave

#### a) Energía de Corte y Malla de Puntos k:

Sistema SrZrO<sub>3</sub>:

- **Energía de corte (*ecutwfc*):**

Se realizó un análisis sistemático en el rango **20–400 Ry**, seleccionando **ecutwfc = 120 Ry** (destacado en amarillo) como valor óptimo. Este parámetro equilibra precisión y eficiencia computacional, con un **error relativo <0.001 eV** respecto al valor de referencia (400 Ry).

- **Red de puntos k:**

Mediante el método de **Monkhorst-Pack**, se determinó una malla **1×1×15**, asegurando convergencia energética con una variación **<0.0005 eV** entre mallas consecutivas. Se validó adicionalmente la estabilidad de la densidad electrónica (*charge density*) con un umbral de **<1×10<sup>-6</sup> eV/atom** para garantizar consistencia en propiedades estructurales.

**Aleaciones Bimetálicas:**

- **Energía de corte (*ecutwfc*):**

Se adoptó  $ecutwfc = 200 \text{ Ry}$ , ajustado para sistemas con mayor número atómico, manteniendo un **error máximo de 0.01 eV** en energía total tras pruebas de convergencia.

- **Red de puntos k:**

Se seleccionó una malla  $15 \times 1 \times 1$ , optimizada para capturar anisotropías en superficies extendidas. La convergencia se verificó con un criterio de **<0.001 eV/Å** en fuerzas atómicas y **<0.005 GPa** en tensión cristalina.

**b) Pseudopotenciales:**

- **SrZrO<sub>3</sub>**

Se evaluaron tres esquemas de intercambio-correlación (**PBE, PBEsol, BLYP**), seleccionando **PBE** por su precisión en sistemas óxidos, con errores <1% en parámetros de red frente a datos experimentales. Se validó mediante comparación con cálculos *all-electron* para garantizar la descripción fiel de electrones de valencia (Zr:  $4d^5 5s^2$ , Sr:  $4d^{10} 5s^2 5p^6$ ).

- **Aleaciones Bimetálicas**

Se emplearon pseudopotenciales **RRKJUS** (ultrasuaves), priorizando su capacidad para modelar interacciones metálicas y efectos de polarización en enlaces Cd–Ag, Cd–Au y Zn–Cu. La transferibilidad se verificó con pruebas de **reproducción de energías de cohesión** (<0.02 eV/atom vs. datos teóricos de referencia).

**c) Criterios de Convergencia**

**1. Energía Total:**

- Umbral de convergencia:  $\Delta E < 1 \times 10^{-6} \text{ eV/atom}$  entre iteraciones consecutivas.
- Estabilidad en densidad electrónica:  $\Delta \rho < 1 \times 10^{-5} \text{ e}^-/\text{bohr}^3$ .

**2. Fuerzas Atómicas:**

- Máxima fuerza residual: **<0.001 eV/Å** en todos los átomos.

**3. Presión Cristalina:**

- Desviación máxima permitida: **<0.01 GPa** en tensores de esfuerzo.

#### 4. Autoconsistencia Electrónica:

- Criterio de mezcla de carga: **0.1–0.3**, con  $<10^{-8}$  Ry en error de diagonalización.

#### 2.3.3. Energía de Cohesión

Tras completar el proceso de relajamiento estructural, en el cual se optimizaron las posiciones atómicas y parámetros de red para garantizar una configuración de mínima energía, se procede a evaluar la energía de cohesión del sistema. Este parámetro fundamental, que representa la energía requerida para separar un sistema en sus átomos constituyentes hasta el infinito, es esencial para caracterizar la estabilidad termodinámica del material. La energía de cohesión se calcula considerando la diferencia entre la energía total del sistema relajado y la suma de las energías de los átomos individuales en estado gaseoso, normalizadas por el número total de átomos en la celda unitaria, como se detalla en la Ecuación 2.1. Este análisis proporciona información clave sobre la fuerza de enlace entre los átomos, siendo un indicador crítico para la predicción del comportamiento mecánico y la durabilidad de los sistemas estudiados.

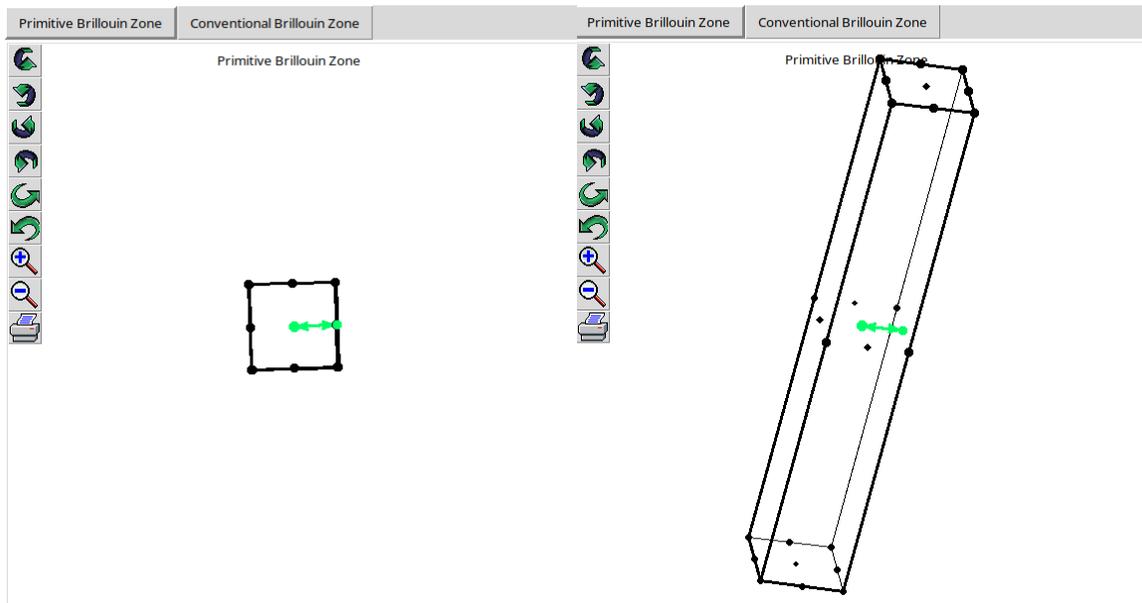
$$E_{\text{cohesión}} = \frac{E_{\text{Sis}} - E_{\text{Sr}}N_{\text{Sr}} - E_{\text{Zr}}N_{\text{Zr}} - E_{\text{O}}N_{\text{O}}}{N_{\text{Sis}}}$$

*Ecuación 2.1 Energía de Cohesión.*

El cálculo de la estructura de bandas y la densidad de estados (DOS) posterior al relajamiento estructural es esencial para analizar las propiedades electrónicas de los materiales. Tras optimizar la geometría del sistema, se calcula la estructura de bandas en el espacio recíproco utilizando métodos de primeros principios como la teoría del funcional de densidad (DFT). La DOS proporciona información clave sobre la distribución de los estados electrónicos, permitiendo comprender fenómenos como la conductividad y la semiconductividad. Estos cálculos son fundamentales para el diseño y la optimización de materiales en diversas aplicaciones tecnológicas.

### 2.3.4. Cálculo de estructura de bandas y densidad de estados electrónicos

En este estudio, se llevaron a cabo cálculos de estructura de bandas y densidad de estados con el objetivo de analizar las propiedades electrónicas del sistema en su estado basal. Para ello, se definió la ruta  $\Gamma$ -X- $\Gamma$  dentro de la primera zona de Brillouin en el espacio recíproco, seleccionada por su relevancia para capturar las principales características de las transiciones electrónicas en el material. Esta ruta específica, junto con su representación gráfica, se muestra en la Figura 2.3, proporcionando una visión clara del recorrido empleado para los cálculos.



*Figura 2.3 Primera Zona de Brillouin para nanoalambres.*

Además, las coordenadas de los puntos en el espacio recíproco correspondientes a esta ruta se detallan en la Tabla 2.3, facilitando la reproducibilidad de los resultados y el análisis preciso de las propiedades electrónicas del sistema. La combinación de la estructura de bandas y la densidad de estados obtenidas a lo largo de esta ruta permite identificar las características fundamentales de la dispersión electrónica y su relación con la estabilidad y el comportamiento del material.

*Tabla 2.3 Coordenadas primera Zona de Brillouin.*

Puntos de alta simetría	Coordenadas recíprocas
-------------------------	------------------------

$\Gamma$	0.0000 0.0000 0.0000
$X$	0.0000 0.0000 0.5000
$\Gamma$	0.0000 0.0000 0.0000

La selección de esta zona en el espacio recíproco permite analizar de manera detallada el comportamiento electrónico del sistema, enfocándose en una región representativa donde se estudia la estructura de bandas y la densidad de estados. Este análisis proporciona información clave sobre las propiedades electrónicas fundamentales del material, tales como la posición del nivel de Fermi, la dispersión de los estados electrónicos y las posibles transiciones entre bandas.

En el presente trabajo, además, se introduce un el caso de estudio enfocado en las propiedades mecánicas de sistemas bimetálicos. Este caso tiene como objetivo explorar su potencial para el desarrollo de sistemas auxéticos con propiedades mecánicas excepcionales, los cuales constituyen una base prometedora para el diseño de metamateriales avanzados con aplicaciones en diversas áreas tecnológicas.

Realizando la optimización de los sistemas de interés se procedió a determinar las propiedades mecánicas mediante el empleo de los siguientes programas desarrollados en python, que permitió obtener el módulo de Young y el coeficiente de Poisson.

### 2.3.5. Análisis y cálculo de módulo de Young en GPa.

Para evaluar las propiedades mecánicas de los materiales estudiados, específicamente el cálculo del módulo de Young, se empleó un enfoque basado en el ajuste polinómico de los datos de energía obtenidos a partir de cálculos de estructura electrónica. Este análisis permitió relacionar el parámetro de red con la energía total, estableciendo una base sólida para derivar las propiedades mecánicas del material.

El procesamiento y análisis de los datos se llevó a cabo utilizando el lenguaje de programación Python, haciendo uso de bibliotecas especializadas como **NumPy**, **Matplotlib**, y **SciPy**. Estas herramientas proporcionaron una infraestructura robusta

para manejar datos, realizar ajustes de curvas, calcular derivadas, y generar visualizaciones gráficas de los resultados.

El método implementado incluyó las siguientes etapas:

1. **Carga y Preparación de Datos:** Los datos fueron importados desde un archivo de texto que contiene dos columnas: el parámetro de red ( $a$ , en Ångströms) y la energía total ( $E$ , en electronvoltios). Los valores se organizaron en arrays para facilitar su manipulación.
2. **Cálculo de la Longitud Inicial:** Considerando que el sistema es unidimensional, se asumió que la longitud inicial ( $L_0$ ) corresponde directamente al valor del parámetro de red en el punto central del conjunto de datos.
3. **Ajuste Polinómico:** Los datos de energía total fueron ajustados utilizando un polinomio de segundo grado:

$$E(a) = a_0 + a_1 a + a_2 a^2$$

Este ajuste permitió obtener los coeficientes del polinomio que describen con precisión la relación entre la energía total y el parámetro de red.

4. **Cálculo del Módulo de Young:** El módulo de Young se derivó a partir de la segunda derivada de la energía respecto al parámetro de red ( $\frac{d^2 E}{da^2}$ ), utilizando un factor de conversión para obtener el valor en unidades de  $N/m$ .
5. **Visualización de Resultados:** Se generaron gráficos detallados que muestran tanto los datos experimentales como el ajuste polinómico, proporcionando una representación visual clara y accesible en dos idiomas: español e inglés.

Los programas desarrollados para llevar a cabo este análisis se describen en detalle en el **apartado de Anexos (Anexo C y D)**, donde se explican las funciones y métodos utilizados, así como el flujo general de los cálculos. Estos anexos incluyen el código fuente documentado y comentarios para facilitar su comprensión y reproducción.

El enfoque descrito no solo permitió calcular el módulo de Young de manera eficiente, sino que también estableció un marco reproducible para el análisis de datos mecánicos en sistemas similares. Este procedimiento puede ser extendido a

estudios más complejos que involucren diferentes estructuras cristalinas o dimensiones.

Una vez concluida la metodología para ambos casos de estudio, se procede a realizar el análisis y la discusión de los resultados obtenidos en el presente trabajo de investigación.

## **Capítulo III. Análisis de resultados.**

En este capítulo se analizan críticamente los resultados obtenidos de la presente investigación. Se analizan los patrones clave que contrastan con la literatura especializada, integrando una visión fundamentada en modelos teóricos.

# Capítulo III. Análisis de Resultados

En este capítulo se presentan y discuten los resultados obtenidos en el estudio de nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  y sistemas bimetálicos de CdAu, CdAg y ZnCu. Se analizan las propiedades estructurales, electrónicas y mecánicas de estos materiales, obtenidas mediante cálculos de primeros principios utilizando el paquete Quantum Espresso. Los resultados incluyen la optimización geométrica de las estructuras, la densidad de estados electrónicos y las propiedades mecánicas relevantes, como el módulo de Young y la relación de Poisson. Estos hallazgos proporcionan una comprensión profunda de las características únicas de estos nanoalambres y materiales bimetálicos, así como su potencial aplicación en dispositivos avanzados de nanotecnología y electrónica.

## 3.1. Nanoalambres de $\text{SrZrO}_3$

### 3.1.1. Propiedades estructurales de nanoalambres 2x2, 3x3 y 4x4 crecidos en las direcciones [100] y [110]

Para la optimización de los nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  crecidos en las direcciones [100] y [110] con unidades de formación 2x2, 3x3 y 4x4 se empleó un potencial de Perdew–Bruke–Ernzerhof de la aproximación de gradiente generalizado. En la fase inicial del presente estudio se estableció la energía de las ondas planas en 120 Ry y la red de puntos k en  $1 \times 1 \times 7$ . Posteriormente mediante el relajamiento estructural las coordenadas atómicas y los parámetros de red se ajustaron simultáneamente hasta obtener un sistema en equilibrio (mínima energía). En la Tabla 3.1 se muestran las fórmulas de los nanoalambres, asociando el coeficiente numérico del subíndice con la cantidad de átomos presentes en los sistemas para cada elemento. Además, se presentan su área de sección transversal, diámetro, parámetros de red iniciales y finales, lo que permite elucidar la determinación de las constantes de red de los sistemas en equilibrio.

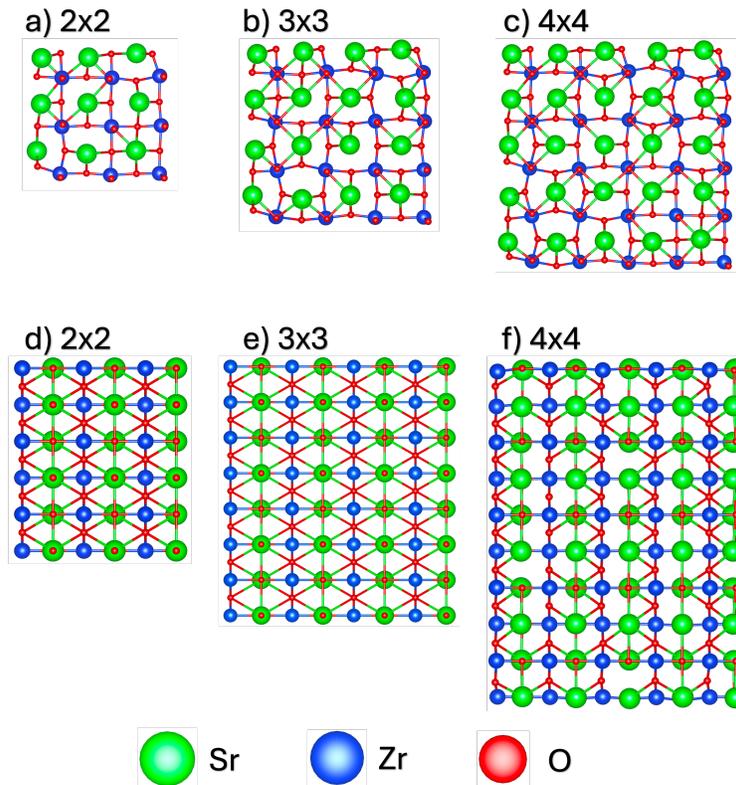
Tabla 3.1 Características Nanoalambres SrZrO<sub>3</sub>.

SrZrONWs	Crecimiento	Sección transversal (Å)	Área de sección transversal (Å <sup>2</sup> )	Parámetro de red inicial (Å)	Parámetro de red final (Å)
<b>Sr<sub>9</sub>Zr<sub>9</sub>O<sub>27</sub></b>	[100]	14.628	119.749	4.150	4.035
<b>Sr<sub>16</sub>Zr<sub>16</sub>O<sub>48</sub></b>		20.326	220.908		4.130
<b>Sr<sub>25</sub>Zr<sub>25</sub>O<sub>75</sub></b>		26.011	365.039		4.161
<b>Sr<sub>18</sub>Zr<sub>18</sub>O<sub>46</sub></b>	[110]	18.828	118.828	5.869	5.818
<b>Sr<sub>32</sub>Zr<sub>32</sub>O<sub>88</sub></b>		22.272	253.549		5.869
<b>Sr<sub>50</sub>Zr<sub>50</sub>O<sub>140</sub></b>		32.495	500.194		6.008

Después de la optimización, la estructura de los nanoalambres de zirconato de estroncio (SrZrONWs) en la dirección [100] mostró deformaciones (Figura 3.1) principalmente en dos enlaces de los nanoalambres: el primero es entre oxígeno y estroncio (O-Sr) y el segundo es entre oxígeno y zirconio (O-Zr). La longitud del enlace O-Sr antes del proceso de relajamiento era de 2.98 Å, mientras que la longitud del enlace O-Zr era de 3.096 Å en los nanoalambres orientados en ambas direcciones. Posterior al relajamiento, la longitud de los enlaces en los sistemas cambió, específicamente, para los nanoalambres orientados en la dirección [100], el enlace O-Sr cambió a 2.878 Å, 2.891 Å y 2.913 Å para los nanoalambres Sr<sub>9</sub>Zr<sub>9</sub>O<sub>27</sub>, Sr<sub>16</sub>Zr<sub>16</sub>O<sub>48</sub> y Sr<sub>25</sub>Zr<sub>25</sub>O<sub>75</sub>, respectivamente. De manera similar, el enlace O-Zr cambió a 2.074 Å, 2.091 Å y 2.128 Å para los sistemas Sr<sub>9</sub>Zr<sub>9</sub>O<sub>27</sub>, Sr<sub>16</sub>Zr<sub>16</sub>O<sub>48</sub> y Sr<sub>25</sub>Zr<sub>25</sub>O<sub>75</sub>, respectivamente.

Cuando se realizó el análisis de la dirección de crecimiento [110], la longitud del enlace O-Sr presentó un cambio a 3.033 Å para los sistemas Sr<sub>18</sub>Zr<sub>18</sub>O<sub>46</sub> y Sr<sub>32</sub>Zr<sub>32</sub>O<sub>88</sub>, siendo ligeramente menor en el caso del sistema Sr<sub>50</sub>Zr<sub>50</sub>O<sub>140</sub> con un valor de 2.980 Å. De manera similar, la longitud del enlace O-Zr cambió a 2.2248 Å para el nanoalambre Sr<sub>18</sub>Zr<sub>18</sub>O<sub>46</sub>, 1.9827 Sr<sub>50</sub>Zr<sub>50</sub>O<sub>140</sub>. Por otro lado, los resultados mostraron una compresión de los nanoalambres Sr<sub>9</sub>Zr<sub>9</sub>O<sub>27</sub> y Sr<sub>16</sub>Zr<sub>16</sub>O<sub>48</sub> (orientados en la dirección [100]), ya que su volumen se reduce de 2672 Å<sup>3</sup> a 2598 Å<sup>3</sup> y de 3617

$\text{\AA}^3$  a  $3600 \text{\AA}^3$ , respectivamente. Sin embargo, el nanoalambre  $\text{Sr}_{25}\text{Zr}_{25}\text{O}_{75}$  se expande de  $4706 \text{\AA}^3$  a  $4718 \text{\AA}^3$ . El estudio mostró que cuando los SrZrONWs crecidos en la dirección  $[110]$ , el sistema  $\text{Sr}_{18}\text{Zr}_{18}\text{O}_{46}$  disminuye su volumen de  $5053 \text{\AA}^3$  a  $5010 \text{\AA}^3$ . Además, los nanoalambres orientados en ambas direcciones tienden a comprimirse a medida que su diámetro disminuía.



*Figura 3.1 Secciones transversales de SrZrONWs con direcciones de crecimiento  $[100]$  y  $[110]$  utilizando diferentes unidades de formación:  $2 \times 2$  (a y d),  $3 \times 3$  (b y e) y  $4 \times 4$  (c y f), respectivamente.*

Posteriormente al analizar el cambio en su estructura resultado del relajamiento fue necesario determinar la estabilidad de los sistemas para ello se realizó el cálculo de la energía de cohesión; En la Figura 3.2 se puede observar la energía de cohesión para los nanoalambres  $\text{SrZrO}_3$  orientados en la dirección  $[100]$  (Figura 3.2a) y en la dirección  $[110]$  (Figura 3.2b). Se observa que el aumento del tamaño de los sistemas resulta en energías de cohesión mayores (se considera el valor absoluto), lo que indica una mayor estabilidad de los nanoalambres a medida que el número de unidades de formación crece pasando de los sistemas  $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$  y finalmente el  $4 \times 4$ . Las energías de cohesión comienzan en valores bajos para

ambos sistemas con un tamaño de 2x2, alcanzando la energía más alta en los sistemas de 4x4, sin embargo, en los sistemas crecidos en la dirección [110] se puede apreciar que el cambio en la energía de cohesión es mínimo en relación al sistemas crecido en [100], donde el comportamiento tiende más a una línea recta que al crecimiento presentado en la otra dirección.

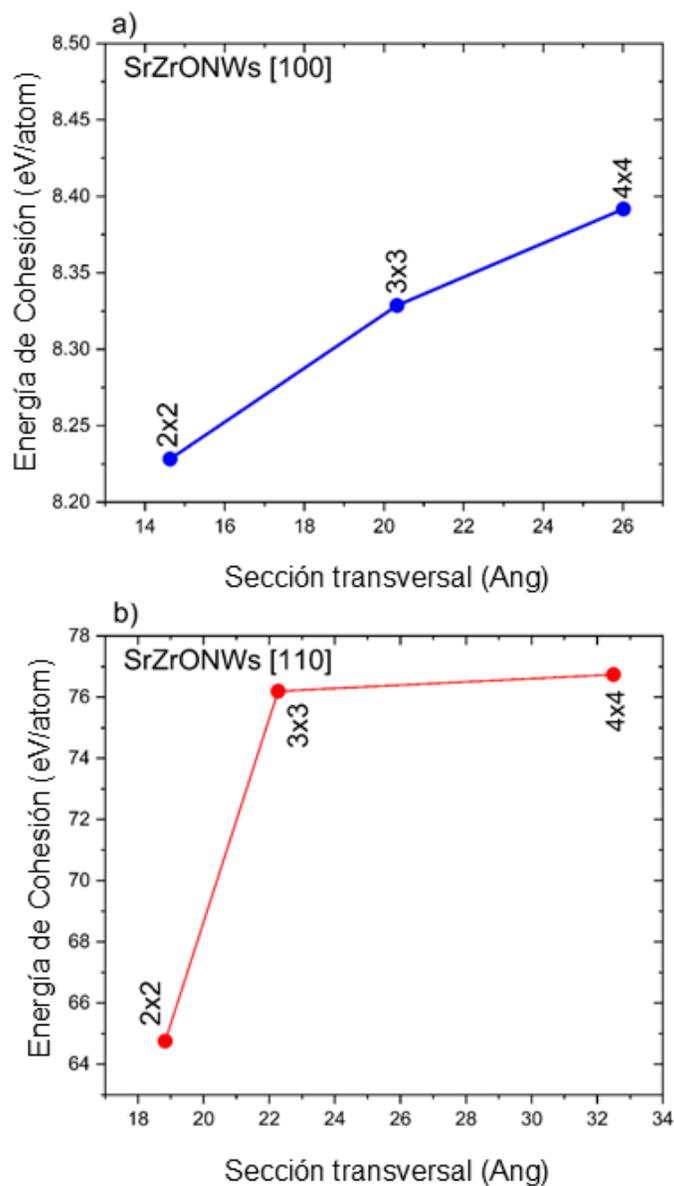


Figura 3.2 Energía de cohesión SrZrONWs con crecimiento en las direcciones [100] (a) y [110] (b).

Una vez se determinaron los parámetros de red de los sistemas y su estabilidad, se procedió a obtener su estructura de bandas y densidad de estados electrónicos, mostrando la relación entre las propiedades estructurales y electrónicas de todos los sistemas de interés.

### **3.1.2. Propiedades electrónicas de nanoalambres crecidos en la dirección [100]**

Se realizaron cálculos de campo autoconsistente utilizando una malla de 101 puntos k para determinar tanto la estructura de bandas electrónicas como la densidad de estados en todos los nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  (SrZrONWs) estudiados. Los resultados confirman que estas nanoestructuras son materiales semiconductores, como se evidencia en las Figuras 3.3 y 3.4. En particular, la Figura 3.3 muestra la estructura de bandas de los nanoalambres orientados en la dirección [100], donde se obtuvieron valores de banda prohibida de 2.268 eV, 2.096 eV y 2.273 eV para los sistemas de 2x2, 3x3 y 4x4, respectivamente.

A diferencia de lo reportado previamente en la literatura para otras nanoestructuras unidimensionales, como nanoalambres y nanotubos, donde la banda prohibida tiende a disminuir con el aumento del diámetro debido a la reducción del confinamiento cuántico, los resultados de este estudio muestran un comportamiento inesperado y divergente. Este fenómeno se atribuye a la influencia predominante de la deformación estructural y la ruptura parcial de enlaces químicos entre los átomos de Zr-O y Sr-O, que desempeñan un papel crucial en la modificación de las propiedades electrónicas del sistema. En particular, el sistema 4x4, que exhibe el mayor porcentaje de deformación, presenta un incremento significativo en la magnitud de su banda prohibida en comparación con el sistema 3x3; Este aumento puede explicarse por la redistribución de la densidad electrónica y la alteración de los niveles de energía orbital causada por la mayor deformación. La expansión de la red en el sistema 4x4 genera una disminución en el traslape orbital efectivo entre los átomos vecinos, especialmente en los enlaces Zr-O y Sr-O, lo que a su vez incrementa la separación energética entre los estados de la banda de valencia y la banda de conducción. Adicionalmente, la deformación induce una mayor localización electrónica, que refuerza el carácter aislante del material. Este

comportamiento distintivo resalta la importancia de los efectos de deformación y las interacciones estructurales en la ingeniería de las propiedades electrónicas de nanoestructuras complejas, proporcionando una perspectiva novedosa para el diseño de materiales con bandas prohibidas ajustables.

Además, se observa que la banda prohibida es de carácter indirecto, con una transición que ocurre entre el punto X (la mayor energía en la banda de valencia) y el punto  $\Gamma$  (la menor energía en la banda de conducción). A medida que aumenta el diámetro de los nanoalambres, el nivel de Fermi se desplaza gradualmente hacia la región de las bandas de conducción, indicando que estos sistemas funcionan como semiconductores de tipo n. Este comportamiento sugiere que los electrones son las partículas portadoras predominantes, con una concentración creciente en la banda de conducción conforme se incrementa el tamaño del sistema.

El desplazamiento hacia energías más bajas de las bandas electrónicas con el aumento del diámetro resalta el efecto del confinamiento cuántico en nanoestructuras de menor tamaño. En sistemas de mayor diámetro, la menor separación energética entre el nivel de Fermi y las bandas de conducción promueve una mayor densidad de estados electrónicos disponibles, lo cual fortalece el carácter semiconductor de tipo n de los nanoalambres. Este fenómeno también apunta a una mejora en la conductividad eléctrica debido a la proximidad del nivel de Fermi con las bandas de conducción.

Este comportamiento, característico de los nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  orientados en la dirección [100], sugiere que la conductividad eléctrica está dominada por los electrones, cuya concentración aumenta con el diámetro del sistema. La reducción de las energías de las bandas electrónicas y el acercamiento del nivel de Fermi a la banda de conducción demuestran la sensibilidad de las propiedades electrónicas de estos nanoalambres a sus dimensiones estructurales.

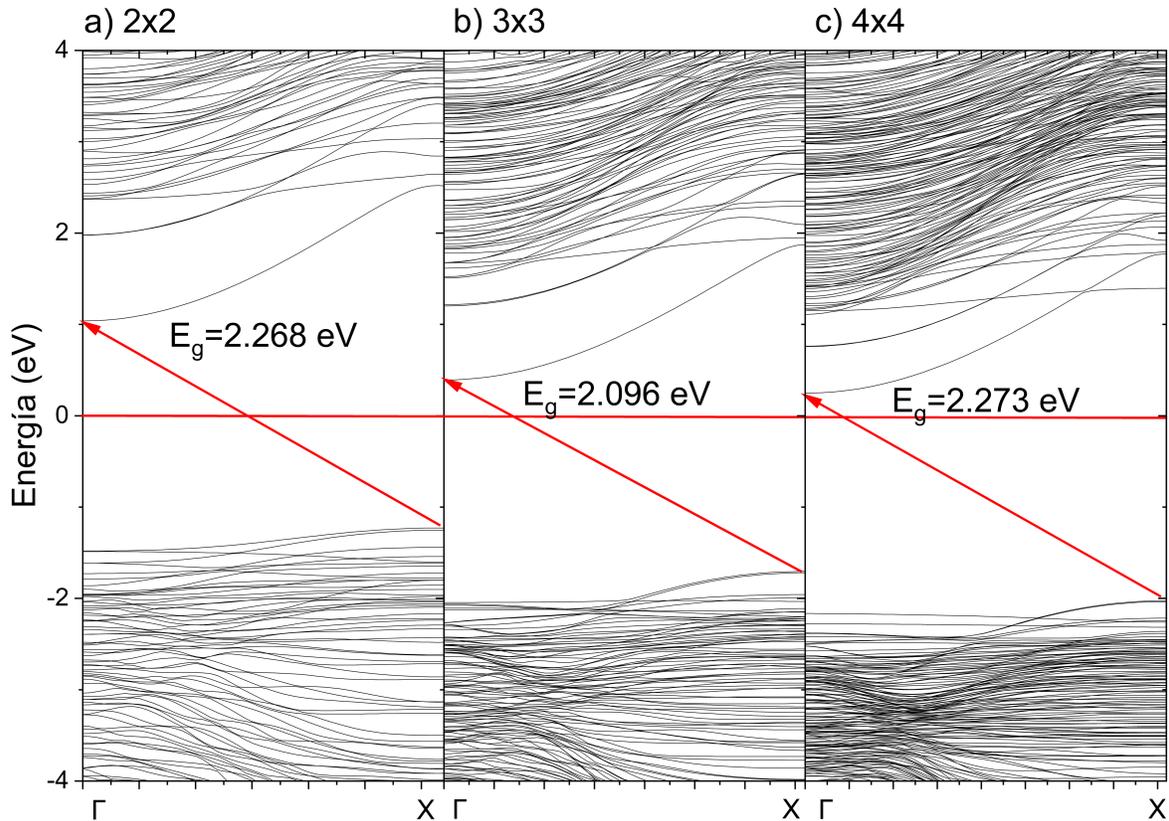


Figura 3.3 Estructura de bandas para nanoalambres estequiométricos de  $\text{SrZrO}_3$  con crecimiento [100] y unidades de formación 2x2 (a), 3x3 (b) y 4x4 (c), respectivamente. La energía de Fermi (línea roja) se muestra a 0 eV.

### 3.1.3. Estructura de bandas de nanoalambres crecidos en la dirección [110]

Por el contrario, los nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  orientados en la dirección [110] presentaron magnitudes de banda prohibida de 1.624 eV, 1.059 eV y 1.779 eV para los sistemas 2x2, 3x3 y 4x4, respectivamente. Los hallazgos indican que la banda prohibida tiende a disminuir a medida que aumenta el diámetro de los nanoalambres. Esto puede observarse al pasar de 2x2 a 3x3, donde la brecha energética disminuye en 0.565 Å, mientras que al aumentar del sistema de 3x3 al de 4x4, la brecha tiende a aumentar en 0.720 Å. Se cree que los átomos mantienen un mayor orden al conservar sus enlaces intactos, satisfaciendo sus necesidades en sistemas de tamaño pequeño e intermedio. En el sistema más grande, presentando un pequeño número de deformaciones, los enlaces no satisfechos podrían generar este aumento en la brecha, observándose de manera similar en los sistemas orientados en [100], donde el nanoalambre más grande, al presentar un

mayor número de defectos y enlaces rotos, aumentó la brecha en comparación con el sistema intermedio, el mismo efecto observado en esta dirección de crecimiento. La transición entre las bandas de valencia y de conducción ocurre en el punto Gamma, como se muestra en la Figura 3.4. A medida que disminuye el diámetro de los sistemas, el nivel de Fermi se desplaza alejándose un poco de las bandas de conducción a medida que el sistema crece; esto implica que los nanoalambres orientados en la dirección [110] son semiconductores de tipo p, ya que a medida que aumenta el diámetro, las bandas electrónicas (bandas de conducción) se desplazan a energías más altas. El cambio en el comportamiento de las transiciones electrónicas al modificar la dirección de crecimiento de los nanoalambres muestra un comportamiento anisotrópico, ya que las propiedades se ven fuertemente afectadas por los tamaños y la dirección de crecimiento de los sistemas de SrZrO<sub>3</sub>, requiriendo más energía en la dirección [100], teniendo una brecha más amplia en todos los nanoalambres y la presencia de una transición indirecta, lo que indica que se requiere una cantidad aún mayor de energía para la recombinación del par electrón-hueco. En contraste, al presentar la dirección [110], la transición predominante fue de una brecha directa, lo que indica que se requieren energías iguales a la brecha de energía para la llevar a cabo la recombinación electrón-hueco.

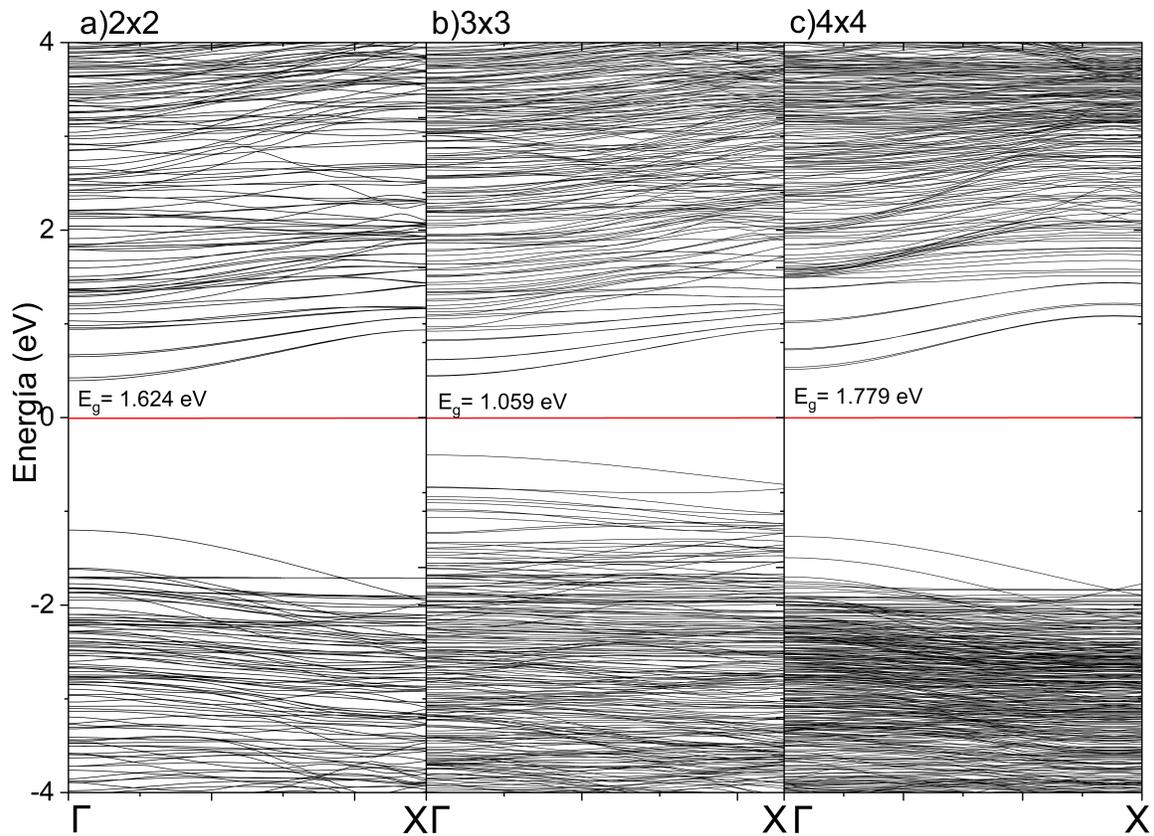


Figura 3.4 Estructura de bandas para nanoalambres estequiométricos de  $\text{SrZrO}_3$  con crecimiento  $[110]$  y unidades de formación  $2 \times 2$  (a),  $3 \times 3$  (b) y  $4 \times 4$  (c), respectivamente. La energía de Fermi (línea roja) se muestra a 0 eV.

### 3.1.4. Densidad de estados proyectada

Para profundizar en la comprensión de las propiedades electrónicas de los nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  descritos en la Tabla 3.1, se realizaron cálculos detallados de la densidad de estados proyectados en los orbitales 2s y 2p del oxígeno, así como en los orbitales 4s, 4p y 4d del estroncio y el zirconio. Los nanoalambres fueron analizados para las orientaciones cristalográficas  $[100]$  y  $[110]$ , considerando tamaños estructurales de  $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$  y  $4 \times 4$ . Los resultados revelan que la contribución de los orbitales a los estados electrónicos disponibles varía significativamente según la orientación y el tamaño del sistema, particularmente en las regiones de valencia y conducción alrededor del nivel de Fermi.

Para los nanoalambres orientados en la dirección  $[100]$ , los estados disponibles en la transición entre las bandas de valencia y la brecha de energía están dominados por los orbitales 2s y 2p del oxígeno, junto con los orbitales 4d y 5s del

zirconio, mientras que el orbital p del estroncio contribuye en menor medida. En la región entre el bandgap y las bandas de conducción, los estados son predominantemente generados por los orbitales s y p del estroncio, así como el orbital p del oxígeno. Esta contribución refleja una interacción electrónica característica de esta orientación, asociada a una mayor dispersión de las bandas de energía.

En contraste, para los nanoalambres orientados en la dirección [110], la contribución electrónica depende en mayor medida del diámetro del sistema. En el caso de los nanoalambres 2x2, los estados electrónicos en las bandas de conducción próximas al bandgap están dominados por el orbital 2p del oxígeno, el orbital 4d del zirconio y el orbital 4p del estroncio. En las bandas de valencia cercanas al bandgap, los estados son proporcionados principalmente por los orbitales s, d y p del zirconio. Para los sistemas de mayor tamaño (3x3 y 4x4), la región de las bandas de conducción cerca del bandgap está dominada por el orbital p del estroncio y los orbitales s y d del zirconio. En la región de las bandas de valencia, los estados electrónicos son mayoritariamente contribuidos por los orbitales s y p del estroncio, junto con los orbitales p y s del zirconio.

El análisis comparativo de la densidad de estados para ambas orientaciones cristalográficas indica que el cambio en la dirección de crecimiento de los nanoalambres altera significativamente el comportamiento electrónico del sistema. En la orientación [110], se observa una mayor densidad de estados en la banda de valencia, lo que contrasta con la dispersión más pronunciada de las bandas en la orientación [100]. Además, la reducción del bandgap en los nanoalambres orientados en la dirección [110], en comparación con los orientados en la dirección [100], valida los resultados obtenidos en los cálculos de estructura de bandas y refuerza la idea de anisotropía electrónica en las nanoestructuras de SrZrO<sub>3</sub>. Este comportamiento se confirma al observar que la máxima densidad de estados en las bandas de conducción ocurre a energías más bajas para los nanoalambres orientados en la dirección [110], destacando la influencia de la orientación cristalográfica en las propiedades electrónicas (ver Figura 3.5).

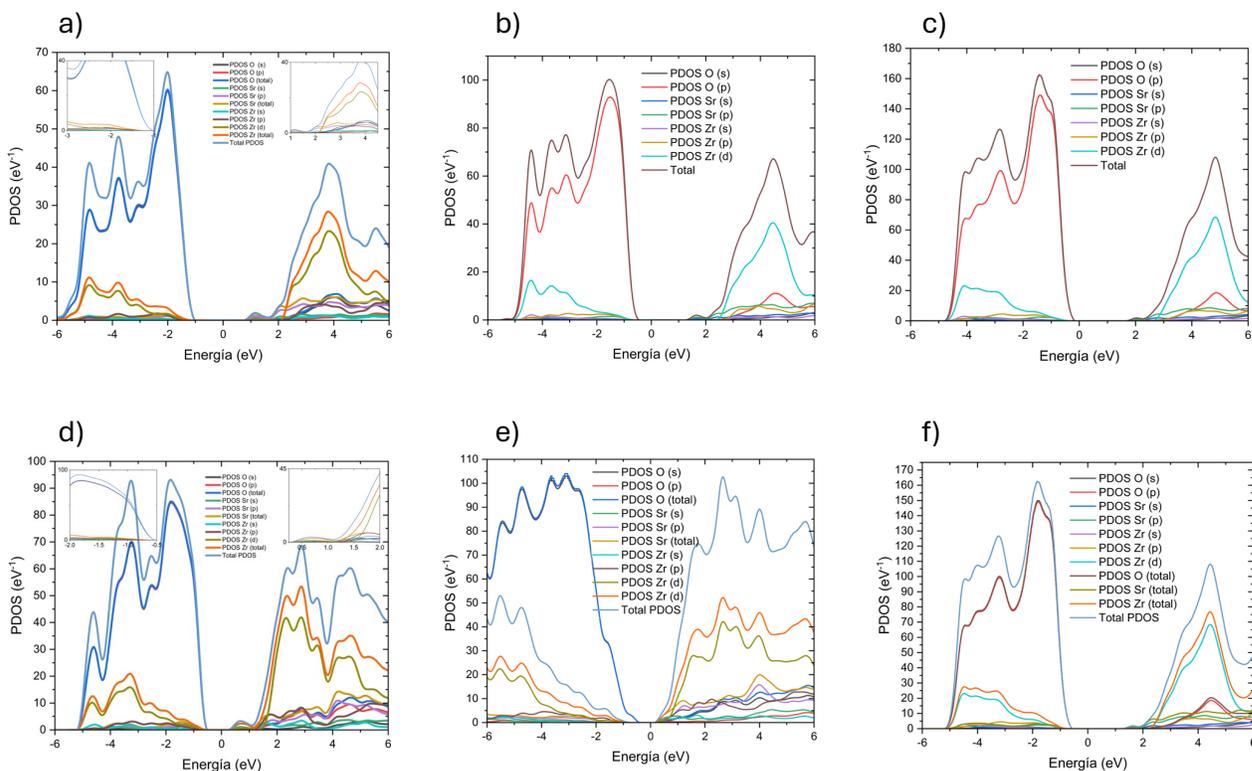


Figura 3.5 Densidad de Estados Proyectados para nanoalambres  $\text{SrZrO}_3$  crecidos en las direcciones  $[100]$  y  $[110]$  con unidades de formación  $2 \times 2$  (a y d),  $3 \times 3$  (b y e) y  $4 \times 4$  (c y f).

### 3.2. Nanoalambres bimetálicos de CdAg, CdAu y ZnCu crecidos en la dirección $[111]$

En los sistemas bimetálicos, la optimización estructural de los nanoalambres fue realizada utilizando cálculos de relajamiento de la estructura cristalina mediante el paquete de software **Quantum Espresso**. El objetivo principal fue encontrar la configuración de mínima energía, variando el parámetro de red, es decir, la distancia interatómica que minimiza la energía total del sistema. Esta optimización estructural es crucial para obtener parámetros precisos que caractericen la estabilidad y las propiedades físicas de los nanoalambres bimetálicos.

Los sistemas seleccionados, **CdAg**, **CdAu** y **ZnCu**, fueron analizados bajo condiciones de equilibrio estructural, y los resultados obtenidos se presentan en la Tabla 3.2. En dicha tabla, se muestran los valores del parámetro de red inicial y la correspondiente energía total de los tres nanoalambres bimetálicos en función de los ajustes realizados al parámetro de red. La configuración en equilibrio, indicada

con el color amarillo, corresponde al valor mínimo de la energía total para cada uno de los sistemas, lo cual es esencial para la correcta evaluación de sus propiedades mecánicas posteriores.

*Tabla 3.2 Datos de optimización estructural de sistemas bimetálicos.*

Nanoalambres bimetálicos						
Quantum Espresso	CdAg		CdAu		ZnCu	
Parámetro de red inicial (Å)	4.606		4.416		4.076	
Optimización estructural	$a_0$ (Å)	Energía total (eV)	$a_0$ (Å)	Energía total (eV)	$a_0$ (Å)	Energía total (eV)
	4.506	-1144.865	4.216	-1315.224	3.876	-1871.425
	4.606	-1144.879	4.316	-1315.232	3.976	-1871.439
	4.706	-1144.893	4.416	-1315.239	4.076	-1871.456
	4.806	-1144.902	4.516	-1315.244	4.176	-1871.467
	<b>4.906</b>	<b>-1144.906</b>	<b>4.616</b>	<b>-1315.246</b>	<b>4.276</b>	<b>-1871.471</b>
	5.006	-1144.905	4.716	-1315.244	4.376	-1871.466
	5.106	-1144.898	4.816	-1315.238	4.476	-1871.455
	5.206	-1144.887	4.916	-1315.227	4.576	-1871.437
	5.306	-1144.873	5.016	-1315.212	4.676	-1871.414

Los valores de la energía total corresponden a los cálculos realizados en cada iteración, mostrando una tendencia decreciente hasta alcanzar el valor mínimo. Esta mínima energía es un indicativo claro de la configuración estable para cada nanoalambre bimetálico.

### 3.2.1. Propiedades mecánicas de nanoalambres bimetálicos

A partir de la optimización estructural, se procedió a obtener las propiedades mecánicas de los sistemas bimetálicos, comenzando con el cálculo del módulo de Young para cada nanoalambre. El módulo de Young, una propiedad fundamental

en la mecánica de materiales que describe la rigidez del material en respuesta a un esfuerzo uniaxial. Para obtener este parámetro, se utilizó la relación entre la energía total y el parámetro de red, y se aplicó un ajuste polinómico a la curva de energía versus parámetro de red.

### **3.2.2. Módulo de Young nanoalambres bimetálicos**

#### **3.2.2.1. Nanoalambre CdAg**

El nanoalambre bimetálico CdAg, crecido en la dirección cristalina [111], presenta una disposición ordenada de átomos en su celda unitaria, característica de materiales cristalinos con alta densidad atómica. Este crecimiento en [111] proporciona una mayor estabilidad estructural, debido a la eficiencia en el empaquetamiento atómico.

En este sistema, los átomos de Cd y Ag están distribuidos de manera que minimizan las interacciones metálicas en su configuración de equilibrio, lo que reduce la energía total del sistema. Esta disposición también disminuye las tensiones internas y favorece una conductividad térmica y eléctrica eficiente, propiedades clave para aplicaciones tecnológicas de nanoalambres bimetálicos. La organización precisa de los átomos en la dirección [111] resulta crucial para optimizar las propiedades mecánicas y funcionales de estos materiales avanzados.

El análisis del nanoalambre CdAg se complementa con un programa desarrollado en Python que emplea datos del tensor de esfuerzo y del tensor de energía derivados de la gráfica de ajuste para determinar el parámetro de red óptimo. Este programa utiliza una ecuación específica basada en principios de mecánica de sólidos y termodinámica computacional para identificar la distancia entre átomos que minimiza la energía total del sistema. La relación entre la energía total y el parámetro de red, representada gráficamente, muestra una curva parabólica característica. Esta tendencia indica que la energía del sistema disminuye progresivamente conforme se ajusta el parámetro de red, hasta alcanzar un valor mínimo que corresponde al estado de mayor estabilidad estructural del nanoalambre. Este enfoque automatizado permite un análisis preciso y eficiente de la configuración estructural más favorable para los nanoalambres bimetálicos.

El mínimo de la curva corresponde al valor de 4.506 Å, que es el parámetro de red de equilibrio para el sistema CdAg. Este valor es el punto donde el sistema alcanza su configuración más estable, es decir, donde las interacciones atómicas entre Cd y Ag están más equilibradas. Los valores de energía más bajos indican una menor tendencia al movimiento de los átomos, lo que significa que el sistema es más estable y menos propenso a sufrir deformaciones estructurales bajo cargas externas (Figura 3.6).

El módulo de Young obtenido fue de 14.92 GPa se relaciona con la rigidez del material en respuesta a la tensión uniaxial. Comparado con otros materiales metálicos, este valor puede considerarse relativamente bajo, lo que sugiere que el sistema CdAg es relativamente flexible o menos rígido. Este valor puede ser influenciado por la estructura cristalina, la naturaleza de las interacciones entre los átomos de Cd y Ag, así como el tamaño de las partículas en el material, todos factores que contribuyen a las propiedades mecánicas globales.

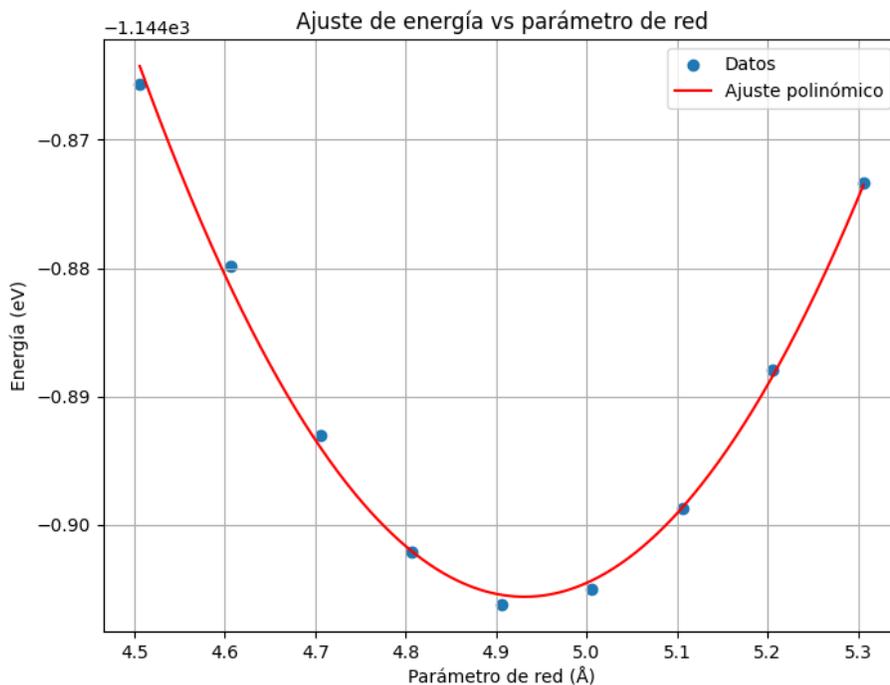


Figura 3.6 Ajuste polinomial para cálculo de módulo de Young del nanoalambre CdAg.

### 3.2.2.2. Nanoalambre CdAu

El nanoalambre bimetálico CdAu, orientado en la dirección cristalina [111], presenta una estructura organizada similar al caso de CdAg, pero con interacciones atómicas más fuertes debido a la mayor afinidad química entre Cd y Au. Estas interacciones fortalecidas impactan directamente en la estabilidad y las propiedades electrónicas del sistema.

La disposición atómica en la red cristalina de CdAu mantiene un alto nivel de orden, aunque muestra una ligera distorsión, resultado de las diferencias en los radios atómicos y las energías de enlace entre los dos metales. Este ajuste estructural refleja la capacidad del sistema para equilibrar las tensiones internas, optimizando su estabilidad y asegurando propiedades mecánicas y electrónicas adecuadas para aplicaciones avanzadas.

La disposición en la dirección [111] de CdAu no solo garantiza una alta estabilidad estructural, sino que también evidencia un comportamiento más rígido en comparación con CdAg, resultado de las interacciones metálicas más intensas entre los átomos de Cd y Au. Esta mayor rigidez se correlaciona directamente con la energía total calculada, la cual es ligeramente menor en el caso de CdAu, indicando una estructura más estable. Asimismo, el parámetro de red de equilibrio de 4.216 Å, obtenido del análisis energético, refuerza la idea de que esta distancia óptima entre los átomos minimiza la energía del sistema, lo que resalta la eficiencia del arreglo estructural en este nanoalambre. La diferencia en la energía mínima entre CdAu y CdAg (observada en las figuras 3.6 y 3.7) refleja la diferencia en la fuerza de las interacciones atómicas entre los componentes del nanoalambre. En el caso de CdAu, debido a las interacciones más fuertes entre Cd y Au, el sistema presenta una mayor rigidez y estabilidad en comparación con CdAg, lo que se traduce en un valor ligeramente menor de la energía total. La Figura 3.7 de igual manera que el caso anterior la relación entre la energía y el parámetro de red para el sistema CdAu, sin embargo, el valor del módulo de Young obtenido fue de 12.05 GPa, indica una rigidez relativamente baja para un material metálico, lo que sugiere que el sistema CdAu tiene una naturaleza relativamente flexible. Este comportamiento puede estar asociado a la naturaleza de la interacción entre los

átomos de Cd y Au, la cual facilita una mayor movilidad atómica cuando se somete a estrés mecánico. En comparación con otros materiales, se puede inferir que el sistema CdAu tiene una mayor susceptibilidad a deformaciones elásticas bajo carga, lo que podría representar una ventaja o una limitación dependiendo del contexto de aplicación y los requerimientos estructurales del dispositivo o sistema en el que se utilice.

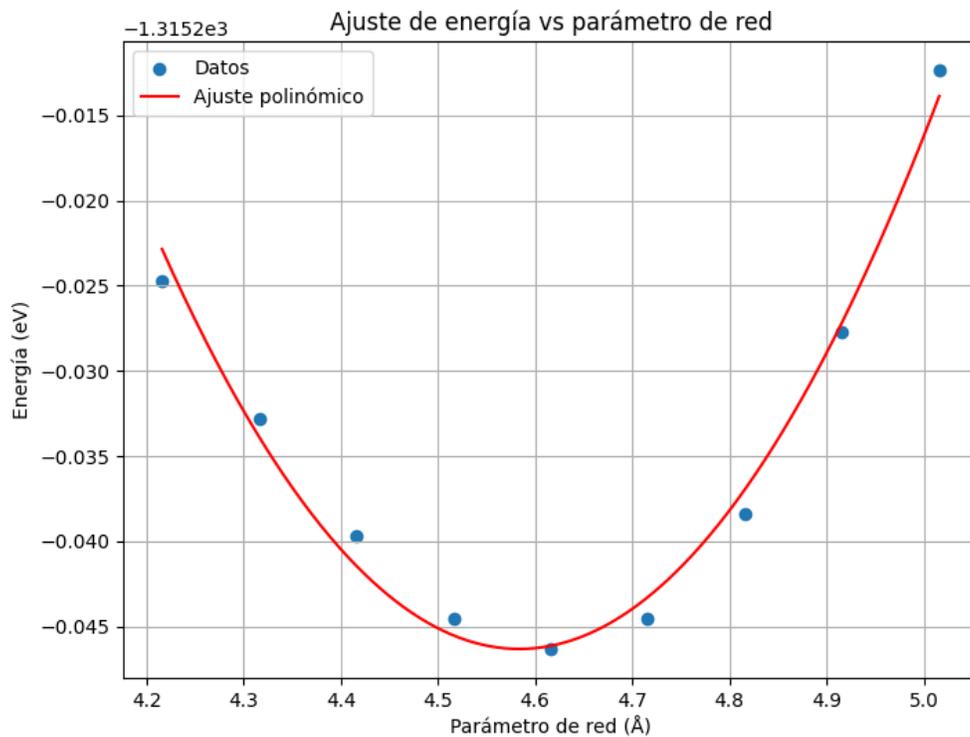


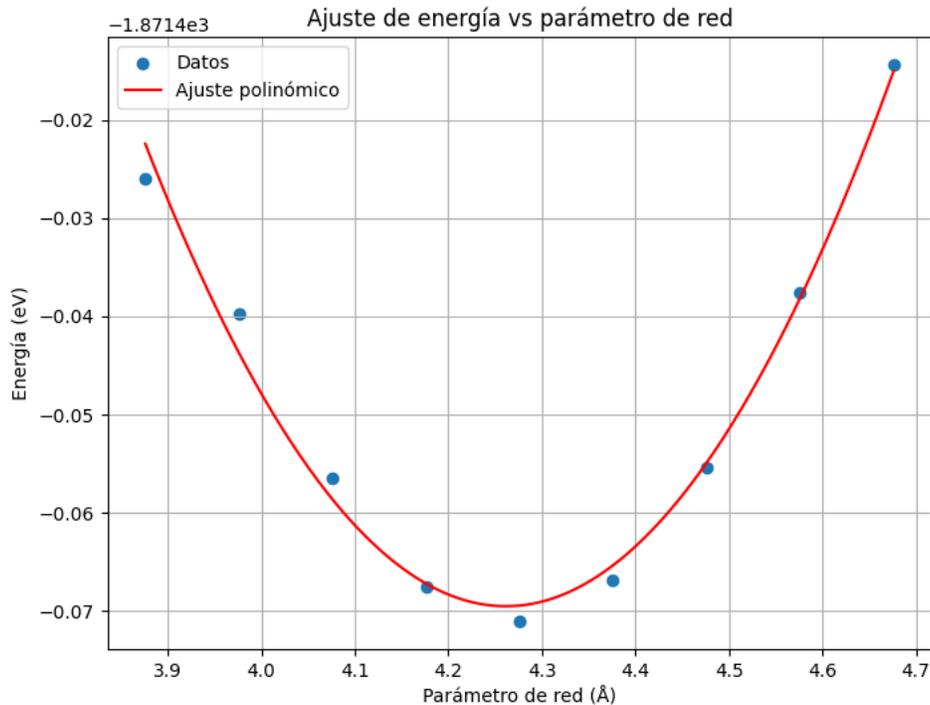
Figura 3.7 Ajuste polinomial para cálculo de módulo de Young del nanoalambre CdAu.

### 3.2.2.3. Nanoalambre ZnCu

El nanoalambre bimetálico ZnCu en la dirección cristalina [111] presenta una organización atómica altamente ordenada y adaptada a la geometría de la celda unitaria. En este sistema, las interacciones entre los átomos de Zn y Cu son significativamente más fuertes en comparación con los sistemas CdAg y CdAu, debido a las diferencias en los radios atómicos y a la mayor energía de enlace característica del Zn y Cu. Estas interacciones robustas se traducen en una estructura más rígida y estable, con un potencial energético reducido que favorece

la minimización de la energía total del sistema. Además, la disposición precisa de los átomos en esta configuración cristalina permite que el nanoalambre ZnCu resista deformaciones bajo cargas aplicadas sin comprometer su integridad estructural, lo que lo convierte en un candidato idóneo para aplicaciones que requieren estabilidad mecánica en condiciones extremas.

En la Figura 3.8, se muestra la gráfica de energía total en función del parámetro de red para el sistema ZnCu. Al igual que las figuras anteriores, la curva presenta un comportamiento parabólico, indicando que la energía total disminuye a medida que el parámetro de red se ajusta. El mínimo de la curva se alcanza a un valor de 3.876 Å, lo que representa la configuración estable del nanoalambre ZnCu. Este valor de parámetro de red es el que minimiza la energía total del sistema, lo que implica que en este valor el nanoalambre se encuentra en su estado más estable. La energía total en el mínimo es significativamente más baja en comparación con los otros dos sistemas, lo que indica que ZnCu es más estable estructuralmente y presenta una mayor rigidez frente a las deformaciones que los nanoalambres CdAg y CdAu, de igual manera este comportamiento se ve directamente relacionado con un incremento en el valor de módulo de Young donde para este sistema resultó de 23.77 GPa lo que es significativamente más alto que el de CdAu (12.05 GPa) y CdAg (14.92 GPa). Esto indica que el nanoalambre ZnCu es más rígido y tiene una mayor resistencia a la deformación elástica. Este valor sugiere que ZnCu es menos flexible y, por lo tanto, podría ser más adecuado para aplicaciones donde se requiere mayor rigidez estructural, como en componentes que deben mantener su forma bajo cargas mecánicas considerables.



*Figura 3.8 Ajuste polinomial para cálculo de módulo de Young del nanoalambre ZnCu.*

Posteriormente para determinar el módulo de Young de los tres sistemas, se procede a la obtención del coeficiente de Poisson con base en el tensor de estrés proporcionado por el código de Quantum Espresso.

#### **3.2.2.4. Coeficiente de Poisson nanoalambres bimetálicos**

En el contexto de los nanoalambres bimetálicos, el análisis de los coeficientes de Poisson es esencial para comprender las propiedades mecánicas anisotrópicas de estos sistemas. Los coeficientes de Poisson describen la relación entre las deformaciones axiales y laterales en un material bajo carga, y en particular, su comportamiento cuando se presentan valores negativos lo que se conoce como auxeticidad tiene implicaciones clave para la ingeniería de metamateriales mecánicos. En este sentido, los valores del coeficiente de Poisson en los nanoalambres CdAg, CdAu, y ZnCu muestran un comportamiento auxético, que es característico en materiales con propiedades inusuales y que se pueden explorar en el diseño de metamateriales con características mecánicas especializadas, como absorción de energía, rigidez controlada y respuesta direccional.

### 3.2.2.5. Nanoalambre CdAg

Un coeficiente de Poisson negativo indica un comportamiento poco común en materiales convencionales. En estos casos, cuando el material es estirado en una dirección, en lugar de contraerse en las direcciones perpendiculares, se expande. Este comportamiento se conoce como efecto auxético. Para el sistema CdAg, se han obtenido los coeficientes de Poisson en dos direcciones diferentes:  $\nu_{xy} = -0.1648$  y  $\nu_{xz} = -0.4181$ .

### 3.2.2.6. Análisis del Coeficiente de Poisson (xy): -0.1648

- El coeficiente de Poisson en la dirección xy para el nanoalambre CdAg tiene un valor negativo de  $-0.1648$ , lo que indica una expansión lateral moderada cuando el material es estirado en la dirección x. Aunque el valor es relativamente pequeño, su signo negativo indica un comportamiento auxético, lo que significa que, a medida que el material se alarga en una dirección (a lo largo del eje x), se expande en las direcciones perpendiculares, es decir, en el plano xy. Este tipo de comportamiento es interesante para aplicaciones que requieren materiales con deformaciones controladas, tales como recubrimientos o dispositivos que deben mantenerse estables bajo ciertas condiciones de carga, sin perder su integridad estructural.
- Este fenómeno de expansión lateral controlada tiene un gran potencial en el diseño de metamateriales que deben funcionar bajo condiciones dinámicas o de alta deformación. Los materiales auxéticos como el CdAg pueden integrarse en estructuras que requieren un comportamiento con capacidad para absorber y distribuir energía de forma eficiente, lo que sería útil en aplicaciones como la protección contra impactos o en sistemas que necesitan cambios en su geometría sin comprometer su funcionalidad estructural.

### 3.2.2.7. Análisis del Coeficiente de Poisson (xz): -0.4181

- El coeficiente de Poisson en la dirección xz de  $-0.4181$  es significativamente más negativo, lo que indica que el CdAg presenta una auxeticidad más pronunciada en esta dirección. Esto implica que, al estirarse en la dirección

x, el material tiende a expandirse más en la dirección z, lo que refleja un comportamiento anisotrópico, es decir, que la respuesta del material no es uniforme en todas las direcciones.

- La auxeticidad en la dirección z sugiere que el CdAg podría ser útil en aplicaciones que requieren una respuesta direccional específica bajo carga. Por ejemplo, en sistemas de absorción de impactos o en estructuras de ingeniería que deben deformarse de manera controlada en una dirección particular mientras mantienen su rigidez en otras direcciones. La posibilidad de manipular las propiedades anisotrópicas de este material abre un abanico de aplicaciones en metamateriales mecánicos, donde se pueden diseñar componentes que respondan de manera eficiente a estímulos mecánicos, como presión o torsión, en direcciones seleccionadas.

#### **3.2.2.8. Nanoalambre CdAu**

En el caso de este sistema, se analizan los coeficientes de Poisson en dos direcciones:  $\nu_{xy} = -0.1454$  y  $\nu_{xz} = -0.4704$ .

#### **3.2.2.9. Interpretación del Coeficiente de Poisson (xy): -0.1454**

- El coeficiente de Poisson en la dirección xy del nanoalambre CdAu, con un valor de  $-0.1454$ , es más pequeño en magnitud comparado con CdAg. Este valor sugiere que la auxeticidad en la dirección xy es moderada, pero no tan pronunciada. El material tiende a expandirse lateralmente cuando es estirado en la dirección x, pero de una manera controlada. Este comportamiento es útil en sistemas donde la expansión lateral debe ser restringida o donde se requiere un control más preciso de la deformación.
- Aunque la auxeticidad no es tan evidente como en otros sistemas, este comportamiento controlado podría ser ventajoso en aplicaciones de metamateriales mecánicos donde se busca una respuesta mecánica predecible bajo carga. En particular, los materiales con una expansión lateral moderada pueden ser útiles en aplicaciones donde se desee evitar una expansión excesiva, como en recubrimientos finos que necesitan mantener sus dimensiones estables bajo condiciones de esfuerzo.

### 3.2.2.10. Interpretación del Coeficiente de Poisson (xz): $-0.4704$ :

- El valor del coeficiente de Poisson en la dirección xz para el nanoalambre CdAu es  $-0.4704$ , lo que indica una tendencia más pronunciada a la expansión en la dirección z cuando el material es estirado en la dirección x. Esta propiedad refuerza la auxeticidad de CdAu, pero con una anisotropía que puede ser aprovechada para diseñar metamateriales que requieren una respuesta direccional específica, especialmente en estructuras donde la deformación en una dirección debe ser maximizada mientras se minimiza en otras.
- Los materiales con coeficientes de Poisson más negativos en una dirección específica son especialmente útiles en metamateriales mecánicos diseñados para aplicaciones como filtros acústicos, materiales para absorción de vibraciones, y dispositivos que aprovechan la deformación controlada para regular el flujo de energía o cambiar las propiedades estructurales bajo carga. La capacidad de CdAu de mostrar un comportamiento auxético más marcado en la dirección z puede ser clave para aplicaciones en las que se necesite un control preciso sobre las deformaciones en tres dimensiones.

### 3.2.2.11. Nanoalambre ZnCu

Se han analizado dos coeficientes de Poisson para el sistema ZnCu:  $\nu_{xy} = -0.1893$  y  $\nu_{xz} = -0.426$ .

### 3.2.2.12. Interpretación del Coeficiente de Poisson (xy): $-0.1893$ :

- El coeficiente de Poisson en la dirección xy para el sistema ZnCu, con un valor de  $-0.1893$ , sugiere una expansión significativa en la dirección y cuando el material es sometido a carga en la dirección x. Este valor es más negativo que los de CdAg y CdAu, lo que indica una auxeticidad moderada. Esta propiedad hace que el ZnCu sea adecuado para aplicaciones en las que se requiere una deformabilidad lateral significativa sin comprometer la estabilidad estructural del material.
- El comportamiento auxético moderado del ZnCu podría ser valioso en metamateriales mecánicos para aplicaciones donde se necesita una mayor

flexibilidad o capacidad de deformación en la dirección lateral, como en el diseño de estructuras con capacidad de absorción de energía o en la fabricación de componentes que operan bajo condiciones de alta deformación. La capacidad de adaptarse a deformaciones laterales sin pérdida de integridad estructural también podría hacer que el ZnCu sea adecuado para aplicaciones en la industria de la microelectrónica o en dispositivos con requisitos de deformación específica.

### **3.2.2.13. Interpretación del Coeficiente de Poisson ( $\nu_{xz}$ ): $-0.4267$ :**

- En la dirección  $xz$ , el coeficiente de Poisson de  $-0.4267$  indica una auxeticidad moderada, aunque menos pronunciada que la observada en CdAu. Sin embargo, este comportamiento sigue mostrando una tendencia hacia la expansión en la dirección  $z$  cuando el material es estirado en la dirección  $x$ , lo que refleja una respuesta anisotrópica. Este comportamiento es indicativo de un material con alta capacidad de deformación en la dirección  $z$ , lo cual puede ser útil en aplicaciones que requieren una respuesta direccional específica.
- La anisotropía revelada por este valor sugiere que ZnCu puede ser aprovechado en metamateriales mecánicos que se diseñen para tener un control preciso de la deformación en una dirección particular. Por ejemplo, en dispositivos de amortiguación o en sistemas que requieren un comportamiento adaptativo ante estímulos mecánicos. La capacidad del ZnCu para deformarse de manera controlada en la dirección  $z$  podría ser utilizada para desarrollar materiales con propiedades personalizadas en función de la dirección de la carga aplicada.

# **Capítulo IV. Discusión de resultados.**

En este capítulo se interpretan los hallazgos obtenidos, contextualizándolos con la literatura especializada. Se discuten las implicaciones en el diseño de materiales, proponiendo aplicaciones prácticas y líneas futuras de investigación derivadas de las limitaciones identificadas.

# Capítulo IV. Discusión de resultados

## 4.1. Caso I. Nanoalambres de Zirconato de Estroncio

Hasta el momento no se han reportado nanoalambres de zirconato de estroncio ( $\text{SrZrO}_3$ ) ni desde un enfoque teórico ni experimental, por lo que los resultados obtenidos en el presente estudio adquieren especial relevancia. Estos materiales presentan modificaciones significativas en su comportamiento electrónico al pasar de un sistema en bulto a uno confinado (1D). En los estudios sobre el STO ( $\text{SrTiO}_3$ ) la energía de Fermi que indica el límite que hay entre las bandas de valencia y conducción se encuentra en un nivel energético diferente y no entra en interacción directamente con las bandas.

Los nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  han mostrado un comportamiento semiconductor dependiente de la dirección de crecimiento, lo que abre múltiples posibilidades para aplicaciones avanzadas. Es interesante notar que para la orientación [100], la brecha energética es del tipo indirecto y se encuentra en el rango del espectro visible. Este tipo de transición indirecta se caracteriza por la dificultad de excitación de electrones, ya que requiere la participación de fonones. Sin embargo, la reducción de la brecha energética en nanoalambres respecto al sistema en bulto permite que este material sea un candidato prometedor como fotocatalizador, ya que, al ser ajustada la brecha de energía (de 5.6 eV a 2.268 eV en la configuración 2x2), el material se vuelve más accesible a la luz visible, permitiendo que realice procesos fotocatalíticos bajo condiciones solares.

El ajuste de la brecha energética de los nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  se facilita aún más cuando se considera la orientación [110]. En esta dirección, se observa una transición directa de banda y valores de brecha energética significativamente menores, lo que amplía aún más el rango de absorción en el espectro solar, entre 540 nm y 1171 nm. Esto puede resultar en una mejora sustancial de la eficiencia en dispositivos como las celdas solares basadas en perovskitas, ya que la absorción eficiente de luz y la conversión de energía se ven optimizadas. La alta movilidad de portadores de carga observada en los nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  sugiere que los electrones y los huecos pueden moverse con facilidad a través del material, lo que

es una propiedad crucial para mejorar la eficiencia de conversión de energía solar en electricidad.

Además de sus aplicaciones como fotocatalizadores y en celdas solares, estos nanoalambres también tienen aplicaciones potenciales en sensores optoelectrónicos, debido a su capacidad para ajustar la brecha energética según las orientaciones y tamaños de los nanoalambres. Esto permitiría la sintonización de las propiedades ópticas y electrónicas para una amplia gama de dispositivos optoelectrónicos.

La Tabla 4.1 ofrece una comparativa detallada de los efectos de la brecha energética en nanoalambres de perovskitas  $\text{SrZrO}_3$  y  $\text{SrTiO}_3$ , proporcionando una visión más clara de las tendencias observadas en función de la orientación y el tamaño del nanoalambre. En el caso de  $\text{SrZrO}_3$ , la dirección [100] muestra una disminución significativa de la brecha energética en comparación con el material en su forma de bulto (5.6 eV), alcanzando valores en el rango de 2.268 eV a 2.096 eV en las configuraciones de nanoalambre. Esta reducción en la brecha energética refleja la capacidad de los nanoalambres de ajustarse a diferentes aplicaciones, particularmente en fotocátalisis y en dispositivos de absorción de energía solar, como se mencionó previamente.

En la orientación [110] de  $\text{SrZrO}_3$ , se observa una brecha energética aún menor (1.624 eV para la configuración 2x2), y un cambio a una transición directa entre bandas, lo que permite una absorción más eficiente de la luz en el rango de longitudes de onda más amplio. La brecha energética varía dependiendo del tamaño del nanoalambre, lo que subraya la importancia de controlar las dimensiones para aplicaciones específicas. Por ejemplo, para un nanoalambre con una configuración 3x3, la brecha energética disminuye a 1.059 eV, lo que lo hace aún más atractivo para aplicaciones que requieran la absorción en longitudes de onda mayores, como en celdas solares de alta eficiencia.

En comparación, los nanoalambres de  $\text{SrTiO}_3$  en las referencias anteriores muestran una brecha energética superior en diversas orientaciones, especialmente en la configuración [001], donde los valores de la brecha energética varían de 2.37 eV a 3.92 eV. Aunque  $\text{SrTiO}_3$  también muestra un comportamiento semiconductor,

la brecha más ancha en comparación con SrZrO<sub>3</sub> implica que SrTiO<sub>3</sub> puede ser más adecuado para aplicaciones que requieran una mayor resistencia a la fotocatalisis y no estén tan enfocadas en la absorción de luz visible. Sin embargo, las configuraciones en nanoalambres permiten una manipulación precisa de la brecha energética, como se observa en los valores menores reportados por Q. Fu y colaboradores y Bandura y colaboradores para el SrTiO<sub>3</sub>.

*Tabla 4.1 Comparación efecto en la brecha energética en nanoalambres de perovskitas STO y SZO.*

Sistema	Autores	Dirección de crecimiento	Brecha energética Bulto (eV)	Tamaño NW	Brecha Energética NW (eV)	Tipo de banda	
SrZrO <sub>3</sub>	Presente estudio PBE	[100]	5.6	2x2	2.268	Indirecta	
				3x3	2.096		
				4x4	2.273		
		[110]		2x2	1.624	Directa	
				3x3	1.059		
				4x4	1.779		
SrTiO <sub>3</sub>	Q. Fu y colaboradores (2012)[271]	[001]	2.37	Terminación Sr	1.20	Indirecta	
				Terminación Ti	1.73	Indirecta	
SrTiO <sub>3</sub>	Andrei V. Bandura y colaboradores (2015)[272]	[001]	3.08	Terminación Sr	3x3	3.92	Indirecta
					4x4	3.60	
					5x5	3.34	
				Terminación Ti	3x3	3.18	Indirecta
					4x4	2.74	
					5x5	2.50	

#### 4.2. Caso II. Nanoalambres bimetálicos

El segundo caso de estudio examina las propiedades mecánicas de tres sistemas bimetálicos: CdAg, CdAu y ZnCu, utilizando cálculos basados en la teoría del funcional de la densidad (DFT). Los parámetros clave analizados, el módulo de Young y el coeficiente de Poisson, son esenciales para caracterizar la rigidez y la respuesta deformacional de estos materiales. Los resultados obtenidos, resumidos en la **Tabla 4.2**, destacan la variabilidad significativa en las propiedades mecánicas

entre los sistemas, subrayando la influencia de las características atómicas y estructurales de cada material.

*Tabla 4.2 Comparación del módulo de Young de los tres sistemas bimetálicos.*

<b>Sistema</b>	<b>Módulo de Young (GPa)</b>	<b>Dirección Auxética</b>	<b>Aplicaciones destacadas</b>
<b>ZnCu</b>	23.77	$xy$	Infraestructura, maquinaria, protección sísmica.
<b>CdAg</b>	14.92	$xz$	Construcción ligera, dispositivos con cargas variables.
<b>CdAu</b>	12.05	$xz$	Electrónica flexible, recubrimientos adaptables.

El módulo de Young, un indicador de la rigidez de un material frente a deformaciones elásticas bajo esfuerzos uniaxiales, varió significativamente entre los tres sistemas estudiados. El sistema ZnCu presentó el valor más alto (23.77 GPa), lo que lo posiciona como el material más rígido de los tres. Este resultado puede atribuirse a una combinación de factores microestructurales, como una red cristalina más compacta y la fortaleza de los enlaces metálicos entre Zn y Cu. En sistemas metálicos, la densidad electrónica y la interacción entre orbitales desempeñan un papel crítico en la modulación de sus propiedades elásticas. En este caso, la contribución de Cu, conocido por su alta rigidez relativa, puede ser un factor clave en el fortalecimiento del sistema ZnCu.

Por otro lado, el sistema CdAg exhibió un módulo de Young intermedio (14.92 GPa), sugiriendo una rigidez moderada que podría ser resultado de una menor densidad electrónica en comparación con ZnCu, junto con una mayor capacidad de acomodación de defectos estructurales en la red cristalina. Este comportamiento intermedio lo convierte en un material versátil, adecuado para aplicaciones donde se requiere un balance entre rigidez y flexibilidad, como en componentes estructurales que deben soportar cargas variables.

El sistema CdAu mostró el menor módulo de Young (12.05 GPa), lo que refleja una mayor flexibilidad relativa. Este resultado puede estar influido por la contribución de Au, cuya estructura electrónica favorece una menor rigidez en comparación con Cu o Zn. Además, la mayor ductilidad inherente de Au podría facilitar la deformación bajo carga, reduciendo la resistencia general del sistema. Este comportamiento sugiere que CdAu podría ser particularmente ventajoso en aplicaciones que requieren adaptabilidad a deformaciones importantes sin comprometer su integridad estructural.

Los coeficientes de Poisson calculados para los tres sistemas revelan un comportamiento auxético en direcciones específicas, lo que representa un hallazgo significativo en el contexto de los metamateriales mecánicos. Este comportamiento, caracterizado por coeficientes de Poisson negativos, es altamente inusual en materiales metálicos convencionales y ofrece oportunidades únicas para aplicaciones avanzadas.

El sistema ZnCu presentó un coeficiente de Poisson  $\nu_{xy} = -0.1893$ , lo que indica una expansión lateral controlada bajo tensión en la dirección  $xy$ . Este comportamiento es altamente deseable en aplicaciones que requieren una combinación de rigidez y capacidad de disipación de energía, como en sistemas de protección contra impactos y estructuras sometidas a movimientos sísmicos. La rigidez intrínseca del material, combinada con su auxeticidad, podría permitir la absorción de grandes cantidades de energía sin comprometer la estabilidad estructural, lo que lo convierte en un candidato prometedor para diseños de ingeniería avanzada.

El sistema CdAu destacó por su comportamiento auxético más pronunciado en la dirección  $xz$  ( $\nu_{xz} = -0.4704$ ). Este valor sugiere una deformabilidad lateral significativamente alta, lo que es especialmente relevante en aplicaciones donde se requiere una adaptación a formas irregulares o una alta capacidad de absorción de tensiones laterales. Este comportamiento puede ser explicado por la capacidad de Au para acomodar deformaciones mediante mecanismos de deslizamiento atómico y la contribución de Cd, que introduce anisotropía en las propiedades mecánicas del sistema. Como resultado, CdAu podría desempeñar un papel crucial en

tecnologías emergentes como dispositivos electrónicos flexibles, recubrimientos adaptativos y componentes que necesitan integrarse en sistemas mecánicos complejos.

CdAg, con un coeficiente de Poisson  $\nu_{xz} = -0.3176$ , mostró un comportamiento equilibrado entre rigidez y auxeticidad. Este material combina una deformabilidad lateral moderada con una resistencia mecánica adecuada, lo que amplía su rango de aplicaciones potenciales. Por ejemplo, podría ser utilizado en componentes estructurales ligeros que deben soportar deformaciones sin comprometer su funcionalidad, como en la construcción ligera o en elementos diseñados para cargas dinámicas moderadas.

Los resultados de este estudio subrayan la importancia de los sistemas bimetálicos en el diseño de materiales con propiedades mecánicas ajustables para aplicaciones específicas. La rigidez superior de ZnCu, combinada con su comportamiento auxético, lo posiciona como un material ideal para aplicaciones estructurales de alto rendimiento, como en elementos de soporte de infraestructuras o en componentes de vehículos diseñados para absorber impactos. Por otro lado, la alta auxeticidad de CdAu sugiere un gran potencial para tecnologías flexibles y adaptativas, como dispositivos electrónicos de nueva generación, recubrimientos inteligentes y sensores mecánicos avanzados. CdAg, con su equilibrio de propiedades, podría llenar un nicho en aplicaciones donde se busca combinar resistencia y adaptabilidad

La Tabla resume las propiedades mecánicas y las aplicaciones destacadas de cada sistema. ZnCu, con su alta rigidez y moderada auxeticidad, es particularmente adecuado para infraestructuras y maquinaria expuestas a cargas extremas. CdAg, con un equilibrio entre rigidez y flexibilidad, se presta para estructuras ligeras y dispositivos sometidos a cargas variables, mientras que CdAu destaca en aplicaciones donde la deformación controlada y la adaptabilidad son esenciales, como en electrónica flexible y recubrimientos inteligentes.

Por otro lado, CdAg se posiciona en un punto intermedio en cuanto a rigidez, lo que le otorga un equilibrio entre flexibilidad y resistencia. Este balance le permite ser versátil en una amplia gama de aplicaciones, donde se requiere tanto rigidez

como cierta capacidad de adaptación a tensiones. Por ejemplo, puede ser útil en la industria automotriz o en componentes electrónicos, donde las piezas deben resistir cierto grado de esfuerzo sin perder su capacidad de adaptación a diferentes condiciones. Este equilibrio lo hace adecuado para sistemas donde se valora una combinación de propiedades mecánicas sin necesidad de una rigidez extrema. El sistema CdAu, por último, es el más flexible de los tres materiales, con el módulo de Young más bajo. Esto indica que tiene una mayor capacidad de deformación sin fracturarse. La menor rigidez puede estar relacionada con una estructura menos compacta o enlaces atómicos más débiles. Sin embargo, esta alta flexibilidad resulta ser una ventaja en aplicaciones que requieren materiales capaces de absorber deformaciones sin comprometer su integridad estructural. Tal comportamiento es esencial en aplicaciones de dispositivos flexibles, como en recubrimientos adaptativos o dispositivos electrónicos que se ajustan a formas irregulares. La alta capacidad de deformación de CdAu lo hace ideal para situaciones donde la adaptación a cambios físicos o espaciales es clave, el análisis del coeficiente de Poisson aporta información clave sobre este comportamiento mecánico en los sistemas de estudio.

La comparación de los resultados obtenidos en este estudio con los de investigaciones previas, como la de Eduard Faber sobre el Nitinol, permite destacar las ventajas mecánicas de los materiales propuestos. Según Faber, la relación de Poisson obtenida fue de  $-0.00323$  y el módulo de Young de  $0.818$  GPa en estructuras a granel de TiNi. Dado que los sistemas estudiados en este trabajo presentan la misma estructura que el TiNi, la comparación es directa y relevante.

Los valores significativamente mejorados en los materiales del presente estudio, indican una mayor resistencia mecánica y una mejor capacidad para soportar esfuerzos sin comprometer su integridad estructural. En particular, el coeficiente de Poisson más favorable sugiere una mejor respuesta a deformaciones transversales bajo carga axial, lo que es crucial en aplicaciones donde la estabilidad dimensional es un factor determinante. Asimismo, el módulo de Young superior implica una

mayor rigidez, lo que resulta ventajoso en componentes estructurales y dispositivos sometidos a cargas mecánicas elevadas.

Un análisis más detallado revela que la diferencia en las propiedades mecánicas puede atribuirse a modificaciones en la nanoestructura, posibles efectos de aleación o mejoras en la distribución de defectos a nivel atómico. Estos factores influyen directamente en la capacidad de los materiales para absorber y distribuir esfuerzos mecánicos de manera más eficiente en comparación con el Nitinol analizado por Faber y colaboradores.

En términos de aplicaciones, estas características hacen que los materiales aquí propuestos sean candidatos ideales para el desarrollo de componentes con alta resistencia al estrés mecánico, menor susceptibilidad a deformaciones no deseadas y una mejor eficiencia en la transmisión de esfuerzos. Estas propiedades los posicionan como alternativas superiores en comparación con los materiales estudiados por Faber, especialmente en sectores como la ingeniería aeroespacial, la biomecánica y la fabricación de dispositivos de alta precisión.

La Tabla 4.3 presenta una comparación detallada de los coeficientes de Poisson obtenidos para los tres sistemas bimetálicos estudiados, proporcionando una visión clara de las características auxéticas de cada material en dos direcciones distintas:  $xy$  y  $xz$ . Estos coeficientes son cruciales para entender cómo los materiales se deforman lateralmente bajo una carga aplicada, y pueden influir directamente en las aplicaciones que requieren comportamientos mecánicos específicos. A continuación, se describen las principales ventajas de cada sistema en función de sus coeficientes de Poisson.

*Tabla 4.3 Comparación de los coeficientes de Poisson.*

<b>Sistema</b>	<b>Poisson (xy)</b>	<b>Poisson (xz)</b>	<b>Ventajas Principales</b>
<b>CdAg</b>	-0.1648	-0.4181	Buena auxeticidad en $xz$ , comportamiento mecánico controlado en $xy$ , ideal para aplicaciones donde se requiere resistencia direccional.

<b>CdAu</b>	-0.1454	-0.4704	Alta auxeticidad en $xz$ , comportamiento anisotrópico pronunciado, excelente para aplicaciones donde se necesita alta deformabilidad en una dirección específica.
<b>ZnCu</b>	-0.1893	-0.4267	Mayor auxeticidad en $xy$ con respecto a los otros sistemas, buen equilibrio en ambas direcciones, versátil para aplicaciones que requieren absorción de energía y flexibilidad en múltiples direcciones.

En este contexto, el sistema ZnCu destaca por su mayor coeficiente de Poisson negativo en la dirección  $xy$  (-0.1893), lo que indica una auxeticidad más pronunciada en comparación con los otros sistemas evaluados. Este comportamiento es particularmente relevante en aplicaciones que requieren una alta capacidad de absorción de energía, como en la protección de estructuras durante movimientos sísmicos. La capacidad de ZnCu para mostrar una flexibilidad multidireccional, con un buen balance entre las direcciones  $xy$  y  $xz$ , lo convierte en un material altamente versátil. Esto le permite adaptarse a diferentes condiciones de carga y deformación sin comprometer su integridad estructural, lo cual es crucial en aplicaciones donde se necesitan materiales con alta resistencia y capacidad de absorción de impactos. Por otro lado, el sistema CdAg presenta un comportamiento mecánico más controlado en la dirección  $xy$ , con una auxeticidad moderada en  $xz$ . Este material se muestra ideal para aplicaciones donde se requiere una resistencia direccional, equilibrando bien las propiedades de flexibilidad y rigidez, lo que lo hace adecuado para situaciones donde se busca estabilidad sin una deformación excesiva.

El sistema CdAu, con un coeficiente de Poisson negativo más pronunciado en la dirección  $xz$  (-0.4704), presenta una alta auxeticidad que lo hace particularmente adecuado para aplicaciones donde se necesitan materiales con una gran capacidad de deformación en una dirección específica. Este comportamiento anisotrópico se

traduce en su aplicabilidad en tecnologías que requieren adaptabilidad bajo condiciones de tensión no uniformes.

## Conclusiones

En este trabajo se investigaron, mediante simulaciones de primeros principios, las propiedades electrónicas de nanoalambres estequiométricos de zirconato de estroncio ( $\text{SrZrO}_3$ ) con direcciones de crecimiento [100] y [110]. Los resultados revelaron diferencias significativas con los reportados por Bandura et al. para  $\text{SrTiO}_3$ , donde nuestro sistema exhibe una clara brecha de energía prohibida acorde con la teoría de bandas, ubicando el nivel de Fermi entre las bandas de valencia y conducción. Estas discrepancias podrían atribuirse al pseudopotencial empleado en nuestro estudio, el cual captura con mayor precisión las interacciones electrónicas en  $\text{SrZrO}_3$ , a diferencia del modelo utilizado por Bandura et al., que no reproduce adecuadamente el comportamiento observado en  $\text{SrTiO}_3$ . Además, se identificó que la orientación [100] influye notablemente en la estructura electrónica: la brecha de banda disminuye al aumentar el tamaño del sistema, excepto en nanoalambres  $4 \times 4$ , donde factores adicionales, como tensiones estructurales o efectos de superficie, podrían modular este comportamiento.

Mediante el análisis de la densidad de estados proyectada (PDOS), se determinó que los orbitales 2p del oxígeno y los orbitales 4d y 5s del zirconio son los principales contribuyentes a las bandas de energía. Por consiguiente, las brechas obtenidas se encuentran dentro del rango del espectro solar, lo que sugiere un alto potencial para aplicaciones fotocatalíticas o en celdas solares. De hecho, estos valores son menores que los del  $\text{TiO}_2$ , fotocatalizador convencional, posicionando a los nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  como candidatos superiores para la conversión de energía solar.

En cuanto a las propiedades mecánicas, los sistemas bimetálicos estudiados ( $\text{CdAg}$ ,  $\text{CdAu}$  y  $\text{ZnCu}$ ) exhibieron un coeficiente de Poisson negativo, indicativo de comportamiento auxético. Este fenómeno, asociado a estructuras que se expanden perpendicularmente bajo carga, se manifiesta de manera anisotrópica:  $\text{CdAg}$  muestra auxeticidad controlada en xz, ideal para resistencia direccional;  $\text{CdAu}$  destaca por su alta deformabilidad en xz, y  $\text{ZnCu}$  combina auxeticidad en xy con versatilidad multidireccional. Además, los módulos de Young revelaron que  $\text{ZnCu}$

posee las propiedades mecánicas más favorables, superando incluso al Nitinol analizado por Faber, gracias a su anisotropía y adaptabilidad bajo carga.

Los hallazgos obtenidos abren nuevas rutas para el diseño de metamateriales mecánicos avanzados. La combinación de auxeticidad y anisotropía permitiría absorber energía en direcciones específicas, ideal para protección sísmica o materiales inteligentes. No obstante, se requiere optimizar parámetros como la composición química y la geometría para maximizar su desempeño. En paralelo, las propiedades electrónicas resaltan la viabilidad de estos sistemas en energías renovables, aunque es esencial validar su estabilidad en condiciones operativas. En síntesis, este trabajo no solo valida la hipótesis inicial que la orientación y el pseudopotencial definen propiedades clave, sino que también establece un marco para explorar materiales multifuncionales con aplicaciones disruptivas en ingeniería y tecnología.

## Referencias

- [1] V. H. Trujillo Morales, *Metamateriales: introducción a sus propiedades y aplicaciones*, Trabajo de graduación, Facultad de Ingeniería, Universidad de San Carlos de Guatemala, 2009.
- [2] W. Cai y V. M. Shalaev, *Optical Metamaterials: Fundamentals and Applications*, 1ª ed., New York, NY: Springer, 2010, 200 p., ISBN 978–1–4419–1150–6; ISBN (ebook) 978–1–4419–1151–3. doi:10.1007/978-1-4419-1151-3.
- [3] C. G. Meca, *Diseño de un metamaterial con índice de refracción negativo en el espectro visible*, Proyecto Final de Carrera, Escuela Técnica Superior de Ingeniería, Universidad Politécnica de Valencia, 2007.
- [4] Martínez Velásquez N. Y. and Rodríguez Martínez J A 2018 Propiedades electrónicas y estructurales del  $\text{Ga}_{1-x}\text{Cr}_x\text{As}$  Rev Acad Colomb Cienc Exactas Fis Nat 42 26–31
- [5] G. Nazir, A. Ahmad, M. F. Khan y S. Tariq, “Putting DFT to the trial: First principles pressure dependent analysis on optical properties of cubic perovskite  $\text{SrZrO}_3$ ,” *Computational Condensed Matter*, vol. 4, pp. 32–39, sep. 2015, doi:10.1016/j.cocom.2015.07.002 .
- [6] M. R. S. Cortés, *Propiedades estructurales y electrónicas del cátodo  $\text{Li}(\text{Mn}_y\text{Fe}_{1-y})\text{PO}_4$  mediante primeros principios*, Tesis de Maestría, Facultad de Ciencias, Universidad Nacional de Colombia, 2013.
- [7] S. Karthäuser, E. Vasco, R. Dittmann y R. Waser, “Fabrication of arrays of  $\text{SrZrO}_3$  nanowires by pulsed laser deposition,” *Nanotechnology*, vol. 15, S122, 2004, doi:10.1088/0957-4484/15/4/002 .
- [8] I. R. Shein, K. I. Shein y A. L. Ivanovskii, “Elastic and electronic properties and stability of  $\text{SrThO}_3$ ,  $\text{SrZrO}_3$  and  $\text{ThO}_2$  from first principles,” *Journal of Nuclear Materials*, vol. 361, pp. 69–77, mar. 2007, doi:10.1016/j.jnucmat.2006.10.045.
- [9] N. F. Muhamad, R. A. Maulat Osman, M. S. Idris y M. N. Mohd Yasin, “Physical and electrical properties of  $\text{SrTiO}_3$  and  $\text{SrZrO}_3$ ,” *EPJ Web of Conferences*, vol. 162, Art. 01052, 2017, doi:10.1051/epjconf/201716201052.
- [10] H. Rétot, A. Bessière, A. Kahn-Harari y B. Viana, “Synthesis and optical characterization of  $\text{SrHfO}_3\text{:Ce}$  and  $\text{SrZrO}_3\text{:Ce}$  nanoparticles,” *Optical Materials*, vol. 30, pp. 1109–1114, 2008, doi:10.1016/j.optmat.2007.05.032.
- [11] V. G. Veselago, “The electrodynamics of substances with simultaneously negative values of  $\epsilon$  and  $\mu$ ,” *Sov. Phys. Usp.*, vol. 10, pp. 509–514, 1968, doi:10.1070/PU1968v010n04ABEH003699 .
- [12] J. B. Pendry y D. R. Smith, “Reversing light with negative refraction,” *Phys. Today*, vol. 57, no. 6, pp. 37–43, Jun. 2004, doi:10.1063/1.1784272.
- [13] R. A. Évarestov, A. V. Bandura y V. E. Aleksandrov, “Calculations of the electronic structure of crystalline  $\text{SrZrO}_3$  in the framework of the density-

- functional theory in the LCAO approximation,” *Phys. Solid State*, vol. 47, pp. 2248–2256, 2005, doi:10.1134/1.2142886.
- [14] A. V. Bandura, R. A. Évarestov y Y. F. Zhukovskii, “Energetic stability and photocatalytic activity of SrTiO<sub>3</sub> nanowires: Ab initio simulations,” *RSC Adv.*, vol. 5, pp. 24115–24125, 2015, doi:10.1039/C5RA00306G.
- [15] M. A. Atikur Rahman, W. Hasan, R. Khatun, M. Z. Hasan, M. H. Rahman, S. Sarker, M. Hasan y J. F. Lubna, “An ab-initio study to investigate the structural, mechanical, electrical, optical and thermal properties of the AZrO<sub>3</sub> (A=Mg, Ca, Sr, Ba, Sn, Cu) compounds,” *Mater. Today Commun.*, vol. 34, Art. 105339, Mar. 2023, doi:10.1016/j.mtcomm.2023.105339.
- [16] R. I. Eglitis, E. A. Kotomin, A. I. Popov, S. P. Kruchinin y R. Jia, “Comparative ab initio calculations of SrTiO<sub>3</sub>, BaTiO<sub>3</sub>, PbTiO<sub>3</sub>, and SrZrO<sub>3</sub> (001) and (111) surfaces as well as oxygen vacancies,” *Low Temp. Phys.*, vol. 48, pp. 80–88, 2022, doi:10.1134/S1063776122010010.
- [17] M. Hussain, F. Ali, H. Ullah, S. Tehreem Iqbal, F. Anjum, M. A. El-Sheikh y Y. H. Shin, “Magneto-optic and thermoelectric response of doped SrZrO<sub>3</sub> for energy storage applications,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 598, Art. 172055, May 2024, doi:10.1016/j.jmmm.2024.172055.
- [18] D. T. Ho, S.-Y. Kwon y S. Y. Kim, “Metal [100] nanowires with negative Poisson’s ratio,” *Sci. Rep.*, vol. 6, Art. 27560, 2016, doi:10.1038/srep27560.
- [19] D. Li, J. Ma, L. Dong y R. S. Lakes, “A bi-material structure with Poisson’s ratio tunable from positive to negative via temperature control,” *Mater. Lett.*, vol. 181, pp. 285–288, 2016, doi:10.1016/j.matlet.2016.05.085.
- [20] M. Fu, F. Liu, and L. Hu, “A novel category of 3D chiral material with negative Poisson’s ratio,” *Compos. Sci. Technol.*, vol. 160, pp. 111–118, 2018, doi:10.1016/j.compscitech.2018.03.017.
- [21] J. Qi, Z. Chen, P. Jiang, W. Hu, Y. Wang, Z. Zhao, X. Cao, S. Zhang, R. Tao, Y. Li, and D. Fang, “Recent Progress in Active Mechanical Metamaterials and Construction Principles,” *Adv. Sci.*, vol. 9, no. 1, Art. no. e2102662, 2022, doi:10.1002/advs.202102662.
- [22] P. M. Balan, A. J. Mertens, and M. V. A. R. Bahubalendruni, “Auxetic mechanical metamaterials and their futuristic developments: A state-of-art review,” *Mater. Today Commun.*, vol. 34, Art. no. 105285, 2023, doi:10.1016/j.mtcomm.2022.105285.
- [23] B. Luo, L. Wu, D. Li, Z. Zhang, X. Yu, G. Li, and H. Song, “Novel atomic-scale graphene metamaterials with broadband electromagnetic wave absorption and ultra-high elastic modulus,” *Carbon*, vol. 196, pp. 146–153, 2022, doi:10.1016/j.carbon.2022.04.065.
- [24] E. Farber, A. Orlov, E. Borisov, A. Replin, S. Kuzin, N. Golubkov, and A. Popovich, “TiNi Alloy Lattice Structures with Negative Poisson’s Ratio:

- Computer Simulation and Experimental Results,” *Metals*, vol. 12, no. 9, Art. no. 1476, 2022, doi:10.3390/met12091476.
- [25] H. Zhang, Y. Li, Z. Lin, Z. Zhang, D. Hu, and Z. Yang, “Excellent mechanical properties of a novel double-diagonal reinforced mechanical metamaterial with tunable Poisson’s ratios inspired by deep-sea glass sponges,” *Mater. Des.*, vol. 250, Art. no. 113628, 2025, doi:10.1016/j.matdes.2025.113628.
- [26] R. H. Mitchell, M. D. Welch, and A. R. Chakhmouradian, “Nomenclature of the perovskite supergroup: A hierarchical system of classification based on crystal structure and composition,” *Miner. Mag.*, vol. 81, no. 3, pp. 411–461, 2017, doi:10.1180/minmag.2016.080.156.
- [27] A. S. Bhalla, R. Guo, and R. Roy, “The perovskite structure – a review of its role in ceramic science and technology,” *Mater. Res. Innov.*, vol. 4, no. 1, pp. 3–26, 2000, doi:10.1007/s100190000062.
- [28] M. A. Peña and J. L. G. Fierro, “Chemical structures and performance of perovskite oxides,” *Chem. Rev.*, vol. 101, no. 7, pp. 1981–2017, 2001, doi:10.1021/cr980129f.
- [29] N. W. Thomas, “Crystal structure–physical property relationships in perovskites,” *Acta Crystallogr. Sect. B*, vol. 45, pp. 337–344, 1989, doi:10.1107/S0108768189003721.
- [30] F. A. Roghabadi, M. Alidaei, S. M. Mousavi, T. Ashjari, A. S. Tehrani, V. Ahmadi, and S. M. Sadrameli, “Stability progress of perovskite solar cells dependent on the crystalline structure: From 3D  $ABX_3$  to 2D Ruddlesden–Popper perovskite absorbers,” *J. Mater. Chem. A*, vol. 7, no. 11, pp. 5898–5933, 2019, doi:10.1039/C8TA10444A.
- [31] Engin Sagirli F Z, Kayali E S, Sarac - A S, Shen L, Gong L, - al, Hijazi M, Le Pennec F and Bernardini S You may also like Electrochemical Impedance Spectroscopic Study on Polypyrrole/Barium Titanate/Poly(acrylonitrile-co-methylacrylate) Nanoparticles Improvement of-phase crystal formation in a  $BaTiO_3$ -modified PVDF membrane Synthesis of  $BaTiO_3$ -CuO Mixed Oxides for CO Gas Sensing.
- [32] M. A. Islam, J. M. Rondinelli, and J. E. Spanier, “Normal mode determination of perovskite crystal structures with octahedral rotations: Theory and applications,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 25, no. 40, Art. no. 405901, 2013, doi:10.1088/0953-8984/25/40/405901.
- [33] Y. Fu, M. P. Hautzinger, Z. Luo, F. Wang, D. Pan, M. M. Aristov, I. A. Guzei, A. Pan, X. Zhu, and S. Jin, “Incorporating Large A Cations into Lead Iodide Perovskite Cages: Relaxed Goldschmidt Tolerance Factor and Impact on Exciton-Phonon Interaction,” *ACS Cent. Sci.*, vol. 5, no. 8, pp. 1377–1386, 2019, doi:10.1021/acscentsci.9b00492.
- [34] A. E. Fedorovskiy, N. A. Drigo, and M. K. Nazeeruddin, “The Role of Goldschmidt’s Tolerance Factor in the Formation of  $A_2BX_6$  Double Halide

- Perovskites and its Optimal Range,” *Small Methods*, vol. 4, no. 6, Art. no. 2000080, 2020, doi:10.1002/smtd.202000080.
- [35] S. C. Tidrow, “Mapping comparison of Goldschmidt’s tolerance factor with perovskite structural conditions,” *Ferroelectrics*, vol. 470, no. 1, pp. 13–27, 2014, doi:10.1080/00150193.2014.931307.
- [36] J. P. Garz, *Estudio de las propiedades estructurales y electrónicas de la perovskita compleja La<sub>2</sub>BiMnO<sub>6</sub>*, Universidad Nacional de Colombia, 2016.
- [37] X. Cheng, Y. Han, and B. Bin Cui, “Fabrication Strategies and Optoelectronic Applications of Perovskite Heterostructures,” *Adv. Opt. Mater.*, vol. 10, no. 4, Art. no. 2101747, 2022, doi:10.1002/adom.202101747.
- [38] M. V. Kovalenko, L. Protesescu, and M. I. Bodnarchuk, “Properties and potential optoelectronic applications of lead halide perovskite nanocrystals,” *Science*, vol. 358, no. 6364, pp. 745–750, 2017, doi:10.1126/science.aan5694.
- [39] P. Docampo and T. Bein, “A Long-Term View on Perovskite Optoelectronics,” *Acc. Chem. Res.*, vol. 49, no. 3, pp. 339–346, 2016, doi:10.1021/acs.accounts.5b00425.
- [40] X. Xu, Y. Xu, J. Ma, Y. Yin, M. Fronzi, X. Wang, and L. Bi, “Tailoring electronic structure of perovskite cathode for proton-conducting solid oxide fuel cells with high performance,” *J. Power Sources*, vol. 489, Art. no. 229500, 2021, doi:10.1016/j.jpowsour.2020.229500.
- [41] Z. Shen, M. Qu, J. Shi, F. E. Oropeza, V. A. de la Peña O’Shea, G. Gorni, C. M. Tian, J. P. Hofmann, J. Cheng, J. Li, y K. H. L. Zhang, “Correlating the electronic structure of perovskite La<sub>1-x</sub>Sr<sub>x</sub>CoO<sub>3</sub> with activity for the oxygen evolution reaction: The critical role of Co 3d hole state,” *J. Energy Chem.*, vol. 65, pp. 637–645, 2022, doi: 10.1016/j.jechem.2021.07.021.
- [42] F. Li, L. Wang, L. Jin, D. Lin, J. Li, Z. Li, Z. Xu, y S. Zhang, “Piezoelectric activity in perovskite ferroelectric crystals,” *IEEE Trans. Ultrason. Ferroelectr. Freq. Control*, vol. 62, no. 1, pp. 18–32, 2015, doi: 10.1109/TUFFC.2014.006829.
- [43] R. Ding, X. Zhang y X. W. Sun, “Organometal Trihalide Perovskites with Intriguing Ferroelectric and Piezoelectric Properties,” *Adv. Funct. Mater.*, vol. 27, no. 48, p. 1704339, 2017, doi: 10.1002/adfm.201702207.
- [44] F. H. Schader, M. Morozov, E. T. Wefring, T. Grande, y K. G. Webber, “Mechanical stability of piezoelectric properties in ferroelectric perovskites,” *J. Appl. Phys.*, vol. 117, no. 13, p. 134102, 2015, doi: 10.1063/1.4919815.
- [45] Y. Bai, T. Siponkoski, J. Peräntie, H. Jantunen, y J. Juuti, “Ferroelectric, pyroelectric, and piezoelectric properties of a photovoltaic perovskite oxide,” *Appl. Phys. Lett.*, vol. 110, no. 17, p. 172902, 2017, doi: 10.1063/1.4974735.

- [46] T. Haeger, R. Heiderhoff, y T. Riedl, "Thermal properties of metal-halide perovskites," *J. Mater. Chem. C Mater.*, vol. 8, no. 38, pp. 14289–14311, 2020, doi: 10.1039/D0TC03754K.
- [47] A. Boudali, M. D. Khodja, B. Amrani, D. Bourbie, K. Amara, y A. Abada, "First-principles study of structural, elastic, electronic, and thermal properties of SrTiO<sub>3</sub> perovskite cubic," *Phys. Lett. A*, vol. 373, no. 9, pp. 879–884, 2009, doi: 10.1016/j.physleta.2008.12.017.
- [48] H. Shen, J. Xu, A. Wu, J. Zhao, y M. Shi, "Magnetic and thermal properties of perovskite YFeO<sub>3</sub> single crystals," *Mater. Sci. Eng. B*, vol. 157, no. 1, pp. 77–80, 2009, doi: 10.1016/j.mseb.2008.12.020.
- [49] N. Suresh Kumar y K. Chandra Babu Naidu, "A review on perovskite solar cells (PSCs), materials and applications," *J. Materiomics*, vol. 7, no. 6, pp. 940–956, 2021, doi: 10.1016/j.jmat.2021.04.002.
- [50] D. Chen y X. Chen, "Luminescent perovskite quantum dots: synthesis, microstructures, optical properties and applications," *J. Mater. Chem. C Mater.*, vol. 7, no. 5, pp. 1413–1446, 2019, doi: 10.1039/C8TC05545A
- [51] Z. Zeng, Y. Xu, Z. Zhang, Z. Gao, M. Luo, Z. Yin, C. Zhang, J. Xu, B. Huang, F. Luo, Y. Du y C. Yan, "Rare-earth-containing perovskite nanomaterials: Design, synthesis, properties and applications," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 49, pp. 1109–1143, 2020, doi:10.1039/C9CS00330D
- [52] D. Amgar, S. Aharon y L. Etgar, "Inorganic and Hybrid Organo-Metal Perovskite Nanostructures: Synthesis, Properties, and Applications," *Adv. Funct. Mater.*, vol. 26, no. 47, pp. 8576–8593, 2016, doi:10.1002/adfm.201603752.
- [53] J. Li, Z. Han, Y. Gu, D. Yu, J. Liu, D. Hu, X. Xu y H. Zeng, "Perovskite Single Crystals: Synthesis, Optoelectronic Properties, and Application," *Adv. Funct. Mater.*, vol. 31, no. 6, Art. no. 2009394, 2021, doi: 10.1002/adfm.202008684.
- [54] P. Fu, Q. Shan, Y. Shang, J. Song, H. Zeng, Z. Ning y J. Gong, "Perovskite nanocrystals: synthesis, properties and applications," *Sci. Bull.*, vol. 62, no. 6, pp. 369–380, 2017, doi:1016/j.scib.2017.01.006.
- [55] S. S. Rong, M. B. Faheem y Y. B. Li, "Perovskite single crystals: Synthesis, properties, and applications," *J. Electron. Sci. Technol.*, vol. 19, no. 1, pp. 1–18, 2021, doi: 10.1016/j.jnlest.2021.100081.
- [56] M. A. Green, A. Ho-Baillie y H. J. Snaith, "The emergence of perovskite solar cells," *Nat. Photonics*, vol. 8, pp. 506–514, 2014, doi: 10.1038/nphoton.2014.134.
- [57] C. Zuo, H. J. Bolink, H. Han, J. Huang, D. Cahen y L. Ding, "Advances in perovskite solar cells," *Adv. Sci.*, vol. 3, no. 10, Art. no. 1600257, 2016, doi: 10.1002/advs.201500324.
- [58] H. S. Jung y N. G. Park, "Perovskite solar cells: From materials to devices," *Small*, vol. 11, no. 1, pp. 10–25, 2015, doi: 10.1002/sml.201402767.

- [59] D. Wang, M. Wright, N. K. Elumalai y A. Uddin, "Stability of perovskite solar cells," *Sol. Energy Mater. Sol. Cells*, vol. 147, pp. 255–275, 2016, doi: 10.1016/j.solmat.2015.12.025.
- [60] J. Y. Kim, J. W. Lee, H. S. Jung, H. Shin y N. G. Park, "High-Efficiency Perovskite Solar Cells," *Chem. Rev.*, vol. 120, no. 15, pp. 7867–7918, 2020, doi: 10.1021/acs.chemrev.0c00107.
- [61] J. Cao y F. Yan, "Recent progress in tin-based perovskite solar cells," *Energy Environ. Sci.*, vol. 14, no. 3, pp. 1286–1325, 2021, doi:10.1039/D0EE04007J.
- [62] S. Ghosh, S. Mishra y T. Singh, "Antisolvents in perovskite solar cells: Importance, issues, and alternatives," *Adv. Mater. Interfaces*, vol. 7, no. 18, Art. no. 2000950, 2020, doi:10.1002/admi.202000950.
- [63] E. B. Kim, M. S. Akhtar, H. S. Shin, S. Ameen y M. K. Nazeeruddin, "A review on two-dimensional (2D) and 2D–3D multidimensional perovskite solar cells: perovskite structures, stability, and photovoltaic performances," *J. Photochem. Photobiol. C: Photochem. Rev.*, vol. 48, Art. no. 100451, 2021, doi: 10.1016/j.jphotochemrev.2021.100405.
- [64] P. Ctibor, "After-glow luminescence of SrZrO<sub>3</sub> prepared by plasma spraying," *Bol. Soc. Esp. Cerám. Vidrio*, vol. 57, no. 4, pp. 190–194, 2018, ISSN 0366-3175.
- [65] N. F. Muhamad, R. Aina, M. Osman, M. S. Idris, M. Najib y M. Yasin, "Physical and electrical properties of SrTiO<sub>3</sub> and SrZrO<sub>3</sub>," *EPJ Web Conf.*, vol. 154, Art. no. 01052, 2017, doi: 10.1051/epjconf/201716201052.
- [66] W. Ma, D. E. Mack, R. Vaßen y D. Stöver, "Perovskite-type strontium zirconate as a new material for thermal barrier coatings," *J. Am. Ceram. Soc.*, vol. 91, no. 8, pp. 2630–2635, 2008, doi:10.1111/j.1551-2916.2008.02472.x.
- [67] G. Celik y S. Cabuk, "First-principles study of electronic structure and optical properties of Sr(Ti,Zr)O<sub>3</sub>," *Cent. Eur. J. Phys.*, vol. 11, no. 3, pp. 387–393, 2013, doi: 10.2478/s11534-013-0176-6.
- [68] E. Mete, R. Shaltaf y O. U. Ellialtıođlu, "Electronic and structural properties of a 4d perovskite: Cubic phase of SrZrO<sub>3</sub>," *Phys. Rev. B*, vol. 68, no. 13, Art. no. 134112, 2003, doi: 10.1103/PhysRevB.68.035119.
- [69] A. M. Shawahni, M. S. Abu-jafar, R. T. Jaradat y T. Ouahrani, "Structural, elastic, electronic and optical properties of SrTMO<sub>3</sub> (TM = Rh, Zr) compounds: insights from FP-LAPW study," *Materials*, vol. 11, no. 1, Art. no. 19, 2018, doi: 10.3390/ma11102057.
- [70] Z. Li, H. Duan, Y. Jin, S. Zhang, Y. Lv, Q. Xu y Y. Hu, "Intrinsic defects and spectral characteristics of SrZrO<sub>3</sub> perovskite," *Physica B*, vol. 534, pp. 105–112, 2018, doi: 10.1016/j.physb.2018.01.029.

- [71] Y. Zhao y D. J. Weidner, "Thermal expansion of SrZrO<sub>3</sub> and BaZrO<sub>3</sub> perovskites," *Phys. Chem. Miner.*, vol. 18, no. 4, pp. 294–301, 1991, doi: 10.1007/BF00200187.
- [72] B. Bendjeriou-Sedjerari, J. Loricourt, D. Goeuriot y P. Goeuriot, "Sintering of BaZrO<sub>3</sub> and SrZrO<sub>3</sub> perovskites: Role of substitutions by yttrium or ytterbium," *J. Alloys Compd.*, vol. 509, pp. 6175–6183, 2011, doi: 10.1016/j.jallcom.2011.02.088.
- [73] N. F. Muhamad, R. A. Maulat Osman, M. S. Idris y M. N. Mohd Yasin, "Physical and electrical properties of SrTiO<sub>3</sub> and SrZrO<sub>3</sub>," *EPJ Web Conf.*, vol. 162, Art. no. 01052, 2017, doi: 10.1051/epjconf/201716201052.
- [74] M. A. Gomez, M. Chunduru, L. Chigweshe y K. M. Fletcher, "The effect of dopant at the Zr site on the proton conduction pathways of SrZrO<sub>3</sub>: An orthorhombic perovskite," *J. Chem. Phys.*, vol. 133, no. 6, Art. no. 064701, 2010, doi: 10.1063/1.3471798.
- [75] T. Yajima, H. Suzuki, T. Yogo y H. Iwahara, "Protonic conduction in SrZrO<sub>3</sub>-based oxides," *Solid State Ionics*, vol. 51, no. 1–3, pp. 47–52, 1992, doi: 10.1016/0167-2738(92)90351-O.
- [76] R. Terki, H. Feraoun, G. Bertrand y H. Aourag, "Full-potential calculation of structural, elastic and electronic properties of BaZrO<sub>3</sub> and SrZrO<sub>3</sub>," *Phys. Status Solidi B*, vol. 242, no. 5, pp. 1054–1062, 2005, doi: 10.1002/pssb.200402142.
- [77] Y. Li, Y. Bai, Z. Li, Y. Gao y W. Ma, "Infrared radiation and thermophysical properties of small band gap Cu-doped SrZrO<sub>3</sub> perovskite ceramic," *Ceram. Int.*, 2024, doi: 10.1016/j.ceramint.2024.07.411.
- [78] Z. Feng, H. Hu, S. Cui y C. Bai, "First-principles study of optical properties of SrZrO<sub>3</sub> in cubic phase," *Solid State Commun.*, vol. 148, no. 12, pp. 472–475, 2008, doi: 10.1016/j.ssc.2008.08.030.
- [79] M. Rizwan, S. Anam, M. Farman, A. Akgul y M. Uzma, "Role of Zn in modification of electronic and optical properties of c-SrZrO<sub>3</sub>: A computational insight," *Phys. Scr.*, vol. 95, no. 12, Art. no. 125801, 2020, doi: 10.1088/1402-4896/ab9f7b.
- [80] S. S. A. Gillani, R. Ahmad, M. Rizwan, M. Rafique, G. Ullah, C. B. Cao y H. B. Jin, "Effect of magnesium doping on band gap and optical properties of SrZrO<sub>3</sub> perovskite: A first-principles study," *Optik*, vol. 191, pp. 132–138, 2019, doi: 10.1016/j.ijleo.2019.05.099.
- [81] T. Matsuda, S. Yamanaka, K. Kurosaki y S.-I. Kobayashi, "High temperature phase transitions of SrZrO<sub>3</sub>," *J. Alloys Compd.*, vol. 351, no. 1–2, pp. 43–46, 2003, doi: 10.1016/S0925-8388(02)01068-X.
- [82] M. I. Khan, M. Riaz, K. A. El-Aziz, M. S. U. Sahar, M. A. Qaisrani y H. T. Ali, "Optimization of cubic SrZrO<sub>3</sub> perovskite oxides under varying stress

- conditions for high-performance optoelectronic devices: a DFT study,” *Multidiscip. Model. Mater. Struct.*, 2024, doi: 10.1108/MMMS-06-2024-0173
- [83] N. Al-Aqtash, A. Alsaad y R. Sabirianov, “Ferroelectric properties of  $\text{BaZrO}_3/\text{PbZrO}_3$  and  $\text{SrZrO}_3/\text{PbZrO}_3$  superlattices: An ab-initio study,” *J. Appl. Phys.*, vol. 116, no. 7, p. 074112, 2014, doi: 10.1063/1.4893300
- [84] S. Li, Y. Wang, M. Yang, S. Xu, M. Liu, Q. Li, J. Miao, E. J. Guo, K. Jin, L. Gu, Q. Zhang, J. Deng, X. Chen y X. Xing, “Ferroelectricity in Low-Permittivity  $\text{SrZrO}_3$  Epitaxial Films,” *Chem. Mater.*, vol. 35, no. 7, pp. 2967–2974, 2023, doi: 10.1021/acs.chemmater.3c00147.
- [85] S. Yoshida, K. Fujita, H. Akamatsu, O. Hernandez, A. Sen Gupta, F. G. Brown, H. Padmanabhan, A. S. Gibbs, T. Kuge, R. Tsuji, S. Murai, J. M. Rondinelli, V. Gopalan y K. Tanaka, “Ferroelectric  $\text{Sr}_3\text{Zr}_2\text{O}_7$ : Competition between hybrid improper ferroelectric and antiferroelectric mechanisms,” *Adv. Funct. Mater.*, vol. 28, no. 46, Art. no. 1806622, 2018, doi: 10.1002/adfm.201801856.
- [86] M. Basini, M. Pancaldi, B. Wehinger, M. Udina, V. Unikandanunni, T. Tadano, M. C. Hoffmann, A. V. Balatsky y S. Bonetti, “Terahertz electric-field-driven dynamical multiferroicity in  $\text{SrTiO}_3$ ,” *Nature*, vol. 628, pp. 534–539, 2024.
- [87] J. K. Singh, S. K. Mandal y G. Banerjee, “Refractive index of different perovskite materials,” *J. Mater. Res.*, vol. 36, no. 9, pp. 1773–1793, 2021, doi: 10.1557/s43578-021-00257-8.
- [88] F. Shi, K. Liang y Z.-M. Qi, “Investigation of the crystal structure, lattice vibration and dielectric property of  $\text{SrZrO}_3$  ceramic,” *J. Mater. Res.*, vol. 31, no. 20, pp. 3249–3254, 2016, doi: 10.1557/jmr.2016.340.
- [89] M. Hussain, F. Ali, H. Ullah, S. T. Iqbal, F. Anjum, M. A. El-Sheikh y Y.-H. Shin, “Magneto-Optic and thermoelectric response of doped  $\text{SrZrO}_3$  for energy storage applications,” *J. Magn. Magn. Mater.*, vol. 598, Art. no. 172055, 2024, doi: 10.1016/j.jmmm.2024.172055.
- [90] G. J. Lopez-Candales, Z. Tang, G. J. Cruz, W. Xia, F. Jia y P. Zhang, “Quasiparticle band structures of the 4d perovskite oxides  $\text{SrZrO}_3$  and  $\text{BaZrO}_3$ ,” *Phys. Rev. B*, vol. 104, Art. no. 085120, 2021, doi: 10.1103/PhysRevB.104.195129.
- [91] R. I. Eglitis, S. Piskunov, A. I. Popov, J. Purans, D. Bocharov y R. Jia, “Systematic Trends in Hybrid-DFT Computations of  $\text{BaTiO}_3/\text{SrTiO}_3$ ,  $\text{PbTiO}_3/\text{SrTiO}_3$  and  $\text{PbZrO}_3/\text{SrZrO}_3$  (001) Hetero Structures,” *Condensed Matter*, vol. 7, no. 4, Art. no. 70, 2022, doi: 10.3390/condmat7040070.
- [92] S. K. Gupta, P. S. Ghosh, A. K. Yadav, N. Pathak, A. Arya, S. N. Jha, D. Bhattacharyya y R. M. Kadam, “Luminescence Properties of  $\text{SrZrO}_3/\text{Tb}^{3+}$  Perovskite: Host-Dopant Energy-Transfer Dynamics and Local Structure of  $\text{Tb}^{3+}$ ,” *Inorg. Chem.*, vol. 55, no. 4, pp. 1728–1740, 2016, doi: 10.1021/acs.inorgchem.5b02639.

- [93] A. W. Rabbani, T. Munawar, M. M. Alam, C. F. Yan, M. Amanullah, F. Mukhtar, M. N. Ashiq, A. Khalid, N. N. Riaz, S. A. Khan, M. Koc y F. Iqbal, "Investigating the electrochemical performance of MnSe-supported SrZrO<sub>3</sub> perovskite oxide nanocomposite as an electrode material for supercapacitor," *Ceram. Int.*, vol. 50, no. 16, pp. 22884–22896, 2024, doi: 10.1016/j.ceramint.2024.04.013
- [94] S. Kumar, V. Sharma, N. Kumari, G. A. Kaur, A. Saha, S. Thakur y M. Shandilya, "Recent advances in perovskite materials: exploring multifaceted properties for energy harvesting applications," *Ionics*, vol. 30, pp. 5159–5188, 2024, doi: 10.1007/s11581-024-05658-3.
- [95] G. Malsch, D. Ivaneyko, P. Milde, L. Wysocki, L. Yang, P. H. M. van Loosdrecht, I. Lindfors-Vrejoiu y L. M. Eng, "Correlating the nanoscale structural, magnetic, and magneto-transport properties in SrRuO<sub>3</sub>-based perovskite thin films: implications for oxide skyrmion devices," *ACS Appl. Nano Mater.*, vol. 3, no. 2, pp. 1182–1190, 2020, doi: 10.1021/acsanm.9b01918.
- [96] P. P. Khirade, R. C. Alange, W. S. Barde y A. R. Chavan, "Structural, electrical and dielectric investigations of cerium doped barium zirconate (BaZrO<sub>3</sub>) nano-ceramics produced via green synthesis: probable candidate for solid oxide fuel cells and microwave applications," *Physica B*, vol. 613, p. 412948, 2021, doi: 10.1016/j.physb.2021.412948.
- [97] P. López-Domínguez, J. Diez-Sierra, S. Schäfer, S. A. Schunk, M. Bäcker, K. De Buysser, I. Van Driessche y H. Rijckaert, "Size-controlled oxide perovskite nanocrystal synthesis: design, optimization, and mechanism insights," *Cryst. Growth Des.*, vol. 24, no. 6, pp. 2362–2369, 2024, doi: 10.1021/acs.cgd.3c01273.
- [98] A. Yoko, N. Umezawa, T. Ohno y Y. Oshima, "Impact of surface energy on the formation of composite metal oxide nanoparticles," *J. Phys. Chem. C*, vol. 122, no. 42, pp. 24350–24358, 2018, doi: 10.1021/acs.jpcc.8b06149.
- [99] J. Zhang, W. Wang, T. Wang, L. Jiang, N. Wang, D. Sun, X. Zhao, M. Wang y Y. Qi, "Nanoscale characterization of the doped SrZrO<sub>3</sub> nanoparticles distribution and its influence on the microstructure of Bi<sub>2</sub>Sr<sub>2</sub>CaCu<sub>2</sub>O<sub>8+δ</sub> film," *J. Alloys Compd.*, vol. 858, Art. no. 158556, 2021, doi: 10.1016/j.jallcom.2020.157650.
- [100] K. H. Huynh, X. H. Pham, J. Kim, S. H. Lee, H. Chang, W. Y. Rho y B. H. Jun, "Synthesis, properties, and biological applications of metallic alloy nanoparticles," *Int. J. Mol. Sci.*, vol. 21, no. 4, Art. no. 1399, 2020, doi: 10.3390/ijms21145174.
- [101] N. Suansuwan y M. V. Swain, "Determination of elastic properties of metal alloys and dental porcelains," *J. Oral Rehabil.*, vol. 28, no. 2, pp. 133–139, 2001, doi: 10.1046/j.1365-2842.2001.00642.x.

- [102] J. M. Dubois, "Properties and applications of quasicrystals and complex metallic alloys," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 41, no. 20, pp. 6760–6777, 2012, doi: 10.1039/C2CS35110B.
- [103] C. J. Long, J. Hattrick-Simpers, M. Murakami, R. C. Srivastava, I. Takeuchi, V. L. Karen y X. Li, "Rapid structural mapping of ternary metallic alloy systems using the combinatorial approach and cluster analysis," *Rev. Sci. Instrum.*, vol. 78, no. 7, Art. no. 072217, 2007, doi: 10.1063/1.2755487.
- [104] H. Jones, "An evaluation of measurements of solid/liquid interfacial energies in metallic alloy systems by the groove profile method," *Metall. Mater. Trans. A*, vol. 38A, no. 7, pp. 1563–1569, 2007, doi: 10.1007/s11661-007-9171-0.
- [105] V. G. Tkachenko, A. I. Kondrashev e I. N. Maksimchuk, "Advanced metal alloy systems for massive high-current photocathodes," *Appl. Phys. B*, vol. 98, no. 4, pp. 839–849, 2010, doi: 10.1007/s00340-009-3887-z.
- [106] Deschamps A, Hutchinson CRR. Precipitation kinetics in metallic alloys: Experiments and modeling. *Acta Mater.* 2021;220:117338. doi: 10.1016/j.actamat.2021.117338.
- [107] Atkinson HV. Modelling the semisolid processing of metallic alloys. *Prog Mater Sci.* 2005;50(3):341–412. doi: 10.1016/j.pmatsci.2004.04.003.
- [108] Jiang H, Zhu J. Modeling of the loading path dependent magnetomechanical behavior of Galfenol alloy. *Chin Phys B.* 2017;26(3):037503. doi: 10.1088/1674-1056/26/3/037503.
- [109] Jani JM, Leary M, Subic A, Gibson MA. A review of shape memory alloy research, applications and opportunities. *Mater Des.* 2014;56:1078–113. doi: 10.1016/j.matdes.2013.11.084.
- [110] Naresh C, Bose PSC, Rao CSP. Shape memory alloys: A state of art review. *IOP Conf Ser Mater Sci Eng.* 2016;149:012054, doi: 10.1088/1757-899X/149/1/012054.
- [111] Ma J, Karaman I, Noebe RD. High temperature shape memory alloys. *Int Mater Rev.* 2010;55(5):257–315. doi: 10.1179/095066010X12646898728363.
- [112] Khandelwal A, Buravalla V. Models for Shape Memory Alloy Behavior: An overview of modeling approaches. 2009;1, pp. 111-148.
- [113] Lobo PS, Almeida J, Guerreiro L. Shape Memory Alloys Behaviour: A Review. *Procedia Eng.* 2015;114:776–83. doi: 10.1016/j.proeng.2015.08.025.
- [114] Baxevanis T, Lagoudas DC. Fracture mechanics of shape memory alloys: review and perspectives. *Int J Fract.* 2015;191(2):191–213. doi: 10.1007/s10704-015-9999-z.
- [115] Costanza G, Tata ME. Shape memory alloys for aerospace, recent developments, and new applications: A short review. *Materials.* 2020;13(8):1856. doi: 10.3390/ma13081856.

- [116] C. A. Biffi, R. Casati, P. Bassani y A. Tuissi, "Functional performances of CuZnAl shape memory alloy open-cell foams," *J. Mater. Eng. Perform.*, vol. 27, no. 4, pp. 1706–1713, 2018, doi: 10.1007/s11665-018-3152-x.
- [117] G. Maîtrejean, P. Terriault, D. Devís Capilla y V. Brailovski, "Unit cell analysis of the superelastic behavior of open-cell tetrakaidecahedral shape memory alloy foam under quasi-static loading," *Smart Mater. Res.*, vol. 2014, art. no. 870649, 2014, doi: 10.1155/2014/870649.
- [118] O. Scalzo, S. Turenne, M. Gauthier y V. Brailovski, "Mechanical and microstructural characterization of porous NiTi shape memory alloys," *Metall. Mater. Trans. A*, vol. 40, no. 9, pp. 2061–2070, 2009, doi: 10.1007/s11661-009-9906-1.
- [119] A. Bansiddhi y D. C. Dunand, "Shape-memory NiTi foams produced by replication of NaCl space-holders," *Acta Biomater.*, vol. 4, no. 6, pp. 1996–2007, 2008, doi: 10.1016/j.actbio.2008.06.005.
- [120] T. Aydoğmuş y Ş. Bor, "Enhanced sintering of TiNi shape memory foams under Mg vapor atmosphere," *Metall. Mater. Trans. A*, vol. 43, no. 12, pp. 5173–5181, 2012, doi: 10.1007/s11661-012-1350-y.
- [121] A. Tabrizikahou, M. Kuczma, M. Łasecka-Plura, E. N. Farsangi, M. Noori, P. Gardoni y S. Li, "Application and modelling of shape-memory alloys for structural vibration control: state-of-the-art review," *Constr. Build. Mater.*, vol. 342, Art. no. 127975, 2022, doi: 10.1016/j.conbuildmat.2022.127975.
- [122] L. Petrini y F. Migliavacca, "Biomedical applications of shape memory alloys," *J. Metall.*, vol. 2011, Art. no. 501483, 2011, doi: 10.1155/2011/501483.
- [123] G. Song, N. Ma y H.-N. Li, "Review of applications of shape memory alloys in civil structures," *Eng. Struct.*, vol. 28, no. 9, pp. 1266–1274, Jul. 2006, doi:10.1016/j.engstruct.2005.12.010.
- [124] D. Mantovani, "Shape memory alloys: Properties and biomedical applications," *JOM*, vol. 52, no. 10, pp. 36–44, Oct. 2000, doi:10.1007/s11837-000-0082-4.
- [125] D. J. Hartl and D. C. Lagoudas, "Aerospace applications of shape memory alloys," *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers, Part G: Journal of Aerospace Engineering*, vol. 221, no. 4, pp. 535–552, 2007, doi: 10.1243/09544100JAERO211.
- [126] L. Janke, C. Czaderski, M. Motavalli, and J. Ruth, "Applications of shape memory alloys in civil engineering structures - Overview, limits and new ideas," *Materials and Structures/Materiaux et Constructions*, vol. 38, no. 1, pp. 578–592, 2005, doi: 10.1007/BF02479550.
- [127] J. Van Humbeeck, "Non-medical applications of shape memory alloys," *Materials Science and Engineering A*, vol. 273–275, pp. 134–148, 1999, doi: 10.1016/S0921-5093(99)00293-2.

- [128] L. C. Brinson and R. Lammering, "Finite element analysis of the behavior of shape memory alloys and their applications," *Mechanics of Materials*, vol. 30, no. 1, pp. 101–112, 1998, doi: 10.1016/0020-7683(93)90113-L.
- [129] G. Song, N. Ma, and H. N. Li, "Applications of shape memory alloys in civil structures," *Engineering Structures*, vol. 28, no. 9, pp. 1266–1274, 2006, doi: 10.1016/j.engstruct.2005.12.010.
- [130] S. Xiao, V. P. Drachev, A. V. Kildishev, X. Ni, U. K. Chettiar, H.-K. Yuan, and V. M. Shalaev, "Loss-free and active optical negative-index metamaterials," *Nature*, vol. 466, no. 7307, pp. 735–738, 2010, doi: 10.1038/nature09278.
- [131] L. M. Castellanos, F. López, and E. Reyes-Vera, "Metamateriales: principales características y aplicaciones," *Ingeniería e Investigación*, vol. 40, no. 3, pp. 395–401, 2016, doi: 10.18257/raccefyn.345.
- [132] A. S. Shalin et al., "Optical cloaking with metamaterials," in 2015 9th International Congress on Advanced Electromagnetic Materials in Microwaves and Optics (METAMATERIALS), 2015, pp. 487–489, doi: 10.1038/nphoton.2007.28.
- [133] S. S. Kruk et al., "Magnetic hyperbolic optical metamaterials," *Nature Communications*, vol. 7, Art. no. 11329, 2016, doi: 10.1038/ncomms11329.
- [134] T. Frenzel, J. Köpfler, E. Jung, M. Kadic, and M. Wegener, "Ultrasound experiments on acoustical activity in chiral mechanical metamaterials," *Nature Communications*, vol. 10, Art. no. 350, 2019, doi: 10.1038/s41467-019-11366-8.
- [135] C. M. Soukoulis and M. Wegener, "Past achievements and future challenges in the development of three-dimensional photonic metamaterials," *Nature Photonics*, vol. 5, pp. 523–530, 2011, doi: 10.1038/nphoton.2011.154.
- [136] K. Nakashima, I. Fujii, and S. Wada, "Low-temperature synthesis of SrZrO<sub>3</sub> nanocubes by the composite-hydroxide-mediated approach," *Journal of Crystal Growth*, vol. 376, pp. 35–40, 2013, doi: 10.1016/j.jcrysgro.2013.04.022
- [137] N. Bibi et al., "Excellent electrochemical performance of SrZrO<sub>3</sub> nanorods as supercapacitor electrode in aqueous electrolytes," *Applied Surface Science*, vol. 495, Art. no. 143587, 2019, doi: 10.1016/j.apsusc.2019.143587.
- [138] A. P. Schlaus et al., "How lasing happens in CsPbBr<sub>3</sub> perovskite nanowires," *Nature Communications*, vol. 10, Art. no. 265, 2019, doi: 10.1038/s41467-018-07972-7.
- [139] H. I. Lin et al., "Enhanced laser action from smart fabrics made with rollable hyperbolic metamaterials," *npj Flexible Electronics*, vol. 4, Art. no. 10, 2020, doi: 10.1038/s41528-020-00085-6.
- [140] T. Vo, A. J. Williamson, and G. Galli, "First principles simulations of the structural and electronic properties of silicon nanowires," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 376–377, pp. 1–12, 2006, doi: 10.1103/PhysRevB.74.045116.

- [141] B. Hwang, C. Gu, D. Lee, and J. S. Lee, "Effect of halide-mixing on the switching behaviors of organic-inorganic hybrid perovskite memory," *Scientific Reports*, vol. 7, Art. no. 43794, 2017, doi: 10.1038/srep43794.
- [142] B. Munkhbat et al., "Transition metal dichalcogenide metamaterials with atomic precision," *Nature Communications*, vol. 11, Art. no. 4604, 2020, doi: 10.1038/s41467-020-18428-2.
- [143] H. N. S. Krishnamoorthy et al., "Infrared dielectric metamaterials from high refractive index chalcogenides," *Nature Communications*, vol. 11, Art. no. 1692, 2020, doi: 10.1038/s41467-020-15444-0.
- [144] L. Wu et al., "A brief review of dynamic mechanical metamaterials for mechanical energy manipulation," *Materials Today*, vol. 44, pp. 168–193, 2021, doi: 10.1016/j.mattod.2020.10.006.
- [145] L. Xin, Y. Siyuan, L. Harry, L. Minghui, and C. Yanfeng, "Topological mechanical metamaterials: A brief review," *Current Opinion in Solid State and Materials Science*, vol. 24, no. 1, pp. 1–9, 2020, doi: 10.1016/j.cossms.2020.100853.
- [146] B. Jenett et al., "Discretely assembled mechanical metamaterials," *Science Advances*, vol. 6, no. 1, eaaz0492, 2020, doi: 10.1126/sciadv.abc9943.
- [147] D. T. Ho, S. D. Park, S. Y. Kwon, K. Park, and S. Y. Kim, "Negative Poisson's ratios in metal nanoplates," *Nature Communications*, vol. 5, Art. no. 3255, 2014, doi: 10.1038/ncomms4255.
- [148] C. Huang and L. Chen, "Negative Poisson's ratio in modern functional materials," *Advanced Materials*, vol. 28, no. 39, pp. 8079–8096, 2016, doi: 10.1002/adma.201601363.
- [149] C. Huang and L. Chen, "Negative Poisson's ratio in modern functional materials," *Advanced Materials*, vol. 28, no. 39, pp. 8079–8096, 2016, doi: 10.1002/adma.201601363.
- [150] R. Lakes, "Deformation mechanisms in negative Poisson's ratio materials: structural aspects," *Journal of Materials Science*, vol. 26, no. 1, pp. 2287–2292, 1991, doi: 10.1007/BF01130170.
- [151] M. R. Haberman and M. D. Guild, "Acoustic metamaterials," *Physics Today*, vol. 69, no. 1, pp. 42–48, 2016, doi: 10.1063/PT.3.3198.
- [152] S. H. Lee, C. M. Park, Y. M. Seo, Z. G. Wang, and C. K. Kim, "Acoustic metamaterial with negative modulus," *Journal of Physics: Condensed Matter*, vol. 21, no. 26, Art. no. 265302, 2009, doi: 10.1088/0953-8984/21/17/175704.
- [153] J. Li and C. T. Chan, "Double-negative acoustic metamaterial," *Physical Review E*, vol. 70, no. 5, Art. no. 055602(R), 2004, doi: 10.1103/PhysRevE.70.055602.
- [154] N. Gao et al., "Acoustic metamaterials for noise reduction: A review," *Advanced Materials Technologies*, vol. 7, no. 5, Art. no. 2101166, 2022, doi: 10.1002/admt.202100698.

- [155] T. S. Almoneef and O. M. Ramahi, "Metamaterial electromagnetic energy harvester with near unity efficiency," *Applied Physics Letters*, vol. 106, no. 7, Art. no. 073902, 2015, doi: 10.1063/1.4916232.
- [156] M. M. Osman et al., "Compressive behavior of stretched and composite microlattice metamaterial for energy absorption applications," *Composites Part B: Engineering*, vol. 184, Art. no. 107668, 2020, doi: 10.1016/j.compositesb.2019.107715.
- [157] D. Shin et al., "Thermoplasmonic and photothermal metamaterials for solar energy applications," *Advanced Optical Materials*, vol. 6, no. 17, Art. no. 1800074, 2018, doi: 10.1002/adom.201800317.
- [158] T. Tan et al., "Renewable energy harvesting and absorbing via multi-scale metamaterial systems for Internet of Things," *Applied Energy*, vol. 254, Art. no. 113681, 2019, doi: 10.1016/j.apenergy.2019.113717.
- [159] Z. Chen, B. Guo, Y. Yang, and C. Cheng, "Metamaterials-based enhanced energy harvesting: A review," *Physica B: Condensed Matter*, vol. 438, pp. 1–8, 2014, doi: 10.1016/j.physb.2013.12.040.
- [160] J. Y. Ou, E. Plum, L. Jiang, and N. I. Zheludev, "Reconfigurable photonic metamaterials," *Nano Letters*, vol. 11, no. 5, pp. 2142–2144, 2011, doi: 10.1021/nl200791r.
- [161] C. M. Soukoulis and M. Wegener, "Past achievements and future challenges in the development of three-dimensional photonic metamaterials," *Nature Photonics*, vol. 5, no. 9, pp. 523–530, 2011, doi: 10.1038/nphoton.2011.154.
- [162] T. Asakura, T. Odaka, R. Nakayama, S. Saito, S. Katsumata, T. Tanaka, and W. Kubo, "Metamaterial thermoelectric conversion," 2022, doi: 10.48550/arXiv.2204.13235.
- [163] X. Zianni, "Thermoelectric metamaterials: Nano-waveguides for thermoelectric energy conversion and heat management at the nanoscale," *Adv. Electron. Mater.*, vol. 7, 2021, doi: 10.1002/aelm.202100176.
- [164] W. Shi, T. Stedman, and L. M. Woods, "Thermoelectric transport control with metamaterial composites," *J. Appl. Phys.*, vol. 128, 2020, doi: 10.1063/5.0004037.
- [165] S. Zheng, M. Ma, Y. Lv, T. Fu, L. Peng, and Q. Zhao, "Dual-band electromagnetically induced transparent metamaterial with slow light effect and energy storage," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 55, 2022, doi: 10.1088/1361-6463/ac5e1a.
- [166] J. You, C. Wang, L. Ma, and S. Yin, "Safe energy-storage mechanical metamaterials via architecture design," *EPJ Appl. Metamater.*, vol. 10, 2023, doi: 10.1051/epjam/2022018.
- [167] N. Baig, I. Kammakakam, W. Falath, and I. Kammakakam, "Nanomaterials: A review of synthesis methods, properties, recent progress, and challenges," *Mater. Adv.*, vol. 2, pp. 1821–1871, 2021, doi: 10.1039/D0MA00807A.

- [168] Q. Wu, W. S. Miao, Y. Du, H. J. Gao, and D. Hui, "Mechanical properties of nanomaterials: A review," *Nanotechnol. Rev.*, vol. 9, pp. 259–273, 2020, doi: 10.1515/ntrev-2020-0021.
- [169] G. Chen, J. Seo, C. Yang, and P. N. Prasad, "Nanochemistry and nanomaterials for photovoltaics," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 42, pp. 8304–8338, 2013, doi: 10.1039/C3CS60054H.
- [170] M. M. Khin, A. S. Nair, V. J. Babu, R. Murugan, and S. Ramakrishna, "A review on nanomaterials for environmental remediation," *Energy Environ. Sci.*, vol. 5, pp. 8075–8109, 2012, doi: 10.1039/C2EE21818F.
- [171] J. R. Peralta-Videa, L. Zhao, M. L. Lopez-Moreno, G. de la Rosa, J. Hong, and J. L. Gardea-Torresdey, "Nanomaterials and the environment: A review for the biennium 2008–2010," *J. Hazard. Mater.*, vol. 186, pp. 1–15, 2011, doi: 10.1016/j.jhazmat.2010.11.020.
- [172] E. Roduner, "Size matters: Why nanomaterials are different," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 35, pp. 583–592, 2006, doi: 10.1039/B502142C.
- [173] S. Y. Lim, W. Shen, and Z. Gao, "Carbon quantum dots and their applications," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 44, pp. 362–381, 2015, doi: 10.1039/C4CS00269E.
- [174] R. Jelinek, *Carbon Nanostructures: Carbon Quantum Dots Synthesis, Properties and Applications*
- [175] T. K. Henna and K. Pramod, "Graphene quantum dots redefine nanobiomedicine," *Mater. Sci. Eng. C*, vol. 110, 2020, doi: 10.1016/j.msec.2020.110651.
- [176] M. A. Reed, "Quantum Dots," *Science*, vol. 268, pp. 118–123, 1993.
- [177] L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, and S. Tarucha, "Few-electron quantum dots," *Rep. Prog. Phys.*, 2001, doi: 10.1088/0034-4885/64/6/201.
- [178] D. Loss and D. P. DiVincenzo, "Quantum computation with quantum dots," *Phys. Rev. A*, vol. 57, pp. 120–126, 1998, doi: 10.1103/PhysRevA.57.120.
- [179] E. H. Sargent, "Infrared quantum dots," *Adv. Mater.*, vol. 17, pp. 515–522, 2005, doi: 10.1002/adma.200401552.
- [180] K. K. Harish, V. Nagasamy, B. Himangshu, and K. Anuttam, "Metallic nanoparticle: A review," *Biomed. J. Sci. Tech. Res.*, vol. 4, 2018, doi: 10.26717/BJSTR.2018.04.001011.
- [181] V. Mody, R. Siwale, A. Singh, and H. Mody, "Introduction to metallic nanoparticles," *J. Pharm. Bioallied Sci.*, vol. 2, pp. 282, 2010, doi: 10.4103/0975-7406.72127.
- [182] M. A. Garcia, "Erratum: Surface plasmons in metallic nanoparticles: Fundamentals and applications," *J. Phys. D: Appl. Phys.*, vol. 45, 2012, doi: 10.1088/0022-3727/44/28/283001.

- [183] A. K. Mittal, Y. Chisti, and U. C. Banerjee, "Synthesis of metallic nanoparticles using plant extracts," *Biotechnol. Adv.*, vol. 31, pp. 346–356, 2013, doi: 10.1016/j.biotechadv.2013.01.003.
- [184] Y. Liu, Q. Yu, J. Chang, and C. Wu, "Nanobiomaterials: From 0D to 3D for tumor therapy and tissue regeneration," *Nanoscale*, vol. 11, pp. 13678–136708, 2019, doi: 10.1039/C9NR02955A.
- [185] R. Wahab, J. Ahmad, and N. Ahmad, "Application of multi-dimensional (0D, 1D, 2D) nanostructures for the cytological evaluation of cancer cells and their bacterial response," *Colloids Surf. A*, vol. 583, 2019, doi: 10.1016/j.colsurfa.2019.123953.
- [186] F. Wang, A. Dong, and W. E. Buhro, "Solution-liquid-solid synthesis, properties, and applications of one-dimensional colloidal semiconductor nanorods and nanowires," *Chem. Rev.*, vol. 116, pp. 10888–10933, 2016, doi: 10.1021/acs.chemrev.5b00701.
- [187] Z. Chen et al., "Recent advances in tin dioxide materials: Some developments in thin films, nanowires, and nanorods," *Chem. Rev.*, vol. 114, pp. 7442–7486, 2014, doi: 10.1021/cr4007335.
- [188] X. Wang, Z. Li, J. Shi, and Y. Yu, "One-dimensional titanium dioxide nanomaterials: Nanowires, nanorods, and nanobelts," *Chem. Rev.*, vol. 114, pp. 9346–9384, 2014, doi: 10.1021/cr400633s.
- [189] R. Takahata and T. Tsukuda, "Ultrathin gold nanowires and nanorods," *Chem. Lett.*, vol. 48, pp. 906–915, 2019, doi: 10.1246/cl.190313.
- [190] N. Wang, Y. Cai, and R. Q. Zhang, "Growth of nanowires," *Mater. Sci. Eng. R Rep.*, vol. 60, pp. 1–51, 2008, doi: 10.1016/j.mser.2008.01.001.
- [191] K. S. Ibrahim, "Carbon nanotubes-properties and applications: A review," *Carbon Lett.*, vol. 14, no. 3, pp. 131–144, 2013, doi: 10.5714/CL.2013.14.3.131.
- [192] C. N. R. Rao, B. C. Satishkumar, A. Govindaraj, and M. Nath, "Nanotubes," *ChemPhysChem*, vol. 2, no. 2, pp. 78–105, 2001, doi: 10.1002/1439-7641(20010216)2:2<78::AID-CPHC78>3.0.CO;2-7.
- [193] E. T. Thostenson, Z. Ren, and T.-W. Chou, "Advances in the science and technology of carbon nanotubes and their composites: a review," *Compos. Sci. Technol.*, vol. 61, no. 13, pp. 1899–1912, 2001, doi: 10.1016/S0266-3538(01)00094-X.
- [194] M. Trojanowicz, "Analytical applications of carbon nanotubes: a review," *TrAC, Trends Anal. Chem.*, vol. 25, no. 5, pp. 480–489, 2006, doi: 10.1016/j.trac.2005.11.008.
- [195] T. Belin and F. Epron, "Characterization methods of carbon nanotubes: A review," *Mater. Sci. Eng. B*, vol. 119, no. 2, pp. 105–118, 2005, doi: 10.1016/j.mseb.2005.02.046.

- [196] R. Hirlekar, M. Yamagar, H. Garse, M. Vij, and K. Vilasrao, "Carbon nanotubes and its applications: A review," *Asian J. Pharm. Clin. Res.*, vol. 2, no. 4, pp. 17–27, 2009.
- [197] Y. Chen et al., "Two-Dimensional Metal Nanomaterials: Synthesis, Properties, and Applications," *Chem. Rev.*, vol. 118, no. 13, pp. 6409–6553, 2018, doi: 10.1021/acs.chemrev.7b00727.
- [198] N. Baig, "Two-dimensional nanomaterials: A critical review of recent progress, properties, applications, and future directions," *Compos. Part A Appl. Sci. Manuf.*, vol. 165, p. 107302, 2023, doi: 10.1016/j.compositesa.2022.107362.
- [199] X. Yu et al., "Emergent Pseudocapacitance of 2D Nanomaterials," *Adv. Energy Mater.*, vol. 8, no. 9, p. 1702873, 2018, doi: 10.1002/aenm.201702930.
- [200] H. Zhang, M. Chhowalla, and Z. Liu, "2D nanomaterials: Graphene and transition metal dichalcogenides," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 47, no. 9, pp. 3015–3036, 2018, doi: 10.1039/C8CS90048E.
- [201] X. Cai, Y. Luo, B. Liu, and H. M. Cheng, "Preparation of 2D material dispersions and their applications," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 47, pp. 6224–6266, 2018, doi: 10.1039/C8CS00254A.
- [202] D. S. L. Abergel, V. Apalkov, J. Berashevich, K. Ziegler, and T. Chakraborty, "Properties of graphene: A theoretical perspective," *Adv. Phys.*, vol. 59, pp. 261–482, 2010, doi: 10.1080/00018732.2010.487978.
- [203] X. Li, J. Yu, S. Wageh, A. A. Al-Ghamdi, and J. Xie, "Graphene in photocatalysis: A review," *Small*, vol. 12, pp. 6640–6696, 2016, doi: 10.1002/sml.201600382.
- [204] A. K. Geim, "Graphene: Status and prospects," *Science*, vol. 324, no. 5934, pp. 1530–1534, 2009, doi: 10.1126/science.1158877.
- [205] G. Yang, L. Li, W. B. Lee, and M. C. Ng, "Structure of graphene and its disorders: A review," *Sci. Technol. Adv. Mater.*, vol. 19, pp. 613–648, 2018, doi: 10.1080/14686996.2018.1494493.
- [206] R. J. Young, I. A. Kinloch, L. Gong, and K. S. Novoselov, "The mechanics of graphene nanocomposites: A review," *Compos. Sci. Technol.*, vol. 72, pp. 1459–1476, 2012, doi: 10.1016/j.compscitech.2012.05.005.
- [207] Y. L. Huang, Y. J. Zheng, Z. Song, D. Chi, A. T. S. Wee, and S. Y. Quek, "The organic–2D transition metal dichalcogenide heterointerface," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 47, pp. 3241–3264, 2018, doi: 10.1039/C8CS00159F.
- [208] Q. Fu et al., "2D transition metal dichalcogenides: Design, modulation, and challenges in electrocatalysis," *Adv. Mater.*, vol. 33, p. 2006899, 2021, doi: 10.1002/adma.201907818.
- [209] R. Yang et al., "2D transition metal dichalcogenides for photocatalysis," *Angew. Chem. Int. Ed.*, vol. 62, p. e202213111, 2023, doi: 10.1002/ange.202218016.

- [210] S. Joseph et al., “A review of the synthesis, properties, and applications of 2D transition metal dichalcogenides and their heterostructures,” *Mater. Chem. Phys.*, vol. 297, p. 127200, 2023, doi: 10.1016/j.matchemphys.2023.127332.
- [211] D. Jiang et al., “Flexible electronics based on 2D transition metal dichalcogenides,” *J. Mater. Chem. A*, vol. 10, pp. 89–121, 2022, doi: 10.1039/D1TA06741A.
- [212] P. R. Sajanlal, T. S. Sreeprasad, A. K. Samal, and T. Pradeep, “Anisotropic nanomaterials: Structure, growth, assembly, and functions,” *Nano Rev.*, vol. 2, p. 5883, 2011, doi: 10.3402/nano.v2i0.5883.
- [213] Y. Cheng, H. Zhang, and X. Qu, “Electronic band-engineered nanomaterials for biosafety and biomedical application,” *Acc. Mater. Res.*, vol. 2, pp. 764–779, 2021, doi: 10.1021/accountsmr.1c00095.
- [214] R. Yu, Q. Lin, S. F. Leung, and Z. Fan, “Nanomaterials and nanostructures for efficient light absorption and photovoltaics,” *Nano Energy*, vol. 1, pp. 57–72, 2012, doi: 10.1016/j.nanoen.2011.10.002.
- [215] V. V. Shnitov et al., “Valence band structure engineering in graphene derivatives,” *Small*, vol. 17, p. 2103087, 2021, doi: 10.1002/smll.202104316.
- [216] A. Piyadasa, S. Wang, and P. X. Gao, “Band structure engineering strategies of metal oxide semiconductor nanowires and related nanostructures: A review,” *Semicond. Sci. Technol.*, vol. 32, p. 093003, 2017, doi: 10.1088/1361-6641/aa6778.
- [217] J. Xi, M. Long, L. Tang, D. Wang, and Z. Shuai, “First-principles prediction of charge mobility in carbon and organic nanomaterials,” *Nanoscale*, vol. 4, pp. 4348–4369, 2012, doi: 10.1039/C2NR30585B.
- [218] S. Ahmad, “Device applications of band-structure-engineered nanomaterials: Current status and future trend,” *Rev. Nanosci. Nanotechnol.*, vol. 8, pp. 1–23, 2015.
- [219] I. S. Nefedov and S. A. Tretyakov, “Photonic band gap structure containing metamaterial with negative permittivity and permeability,” *Phys. Rev. E*, vol. 66, no. 3, p. 036611, 2002, doi: 10.1103/PhysRevE.66.036611.
- [220] J. Zhao, Y. Li, and W. K. Liu, “Predicting band structure of 3D mechanical metamaterials with complex geometry via XFEM,” *Comput. Mech.*, vol. 55, pp. 659–672, 2015, doi: 10.1007/s00466-015-1129-2.
- [221] A. Bacigalupo, M. Lepidi, G. Gnecco, F. Vadalà, and L. Gambarotta, “Optimal design of the band structure for beam lattice metamaterials,” *Front. Mater.*, vol. 6, p. 115, 2019, doi: 10.3389/fmats.2019.00002.
- [222] P. Makkar and N. N. Ghosh, “A review on the use of DFT for the prediction of the properties of nanomaterials,” *RSC Adv.*, vol. 11, pp. 27897–27924, 2021, doi: 10.1039/D1RA04876G.
- [223] E. W. Tait, L. E. Ratcliff, M. C. Payne, P. D. Haynes, and N. D. M. Hine, “Simulation of electron energy loss spectra of nanomaterials with linear-

- scaling density functional theory,” *J. Phys. Condens. Matter*, vol. 28, no. 49, p. 495901, 2016, doi: 10.1088/0953-8984/28/19/195202.
- [224] J. Linares et al., “Shape, size, pressure and matrix effects on 2D spin crossover nanomaterials studied using density of states obtained by dynamic programming,” *Comput. Mater. Sci.*, vol. 187, p. 110119, 2021, doi: 10.1016/j.commatsci.2020.110061.
- [225] Y. Chen et al., “Determination of Young’s modulus of ultrathin nanomaterials,” *Nano Lett.*, vol. 15, pp. 5279–5283, 2015, doi: 10.1021/acs.nanolett.5b01603.
- [226] H. F. Pastrana, A. X. Cartagena-Rivera, A. Raman, and A. Ávila, “Evaluation of the elastic Young’s modulus and cytotoxicity variations in fibroblasts exposed to carbon-based nanomaterials,” *J. Nanobiotechnol.*, vol. 17, no. 1, p. 61, 2019, doi: 10.1186/s12951-019-0460-8.
- [227] B. Nysten, C. Fretigny, and S. Cuenot, “Elastic modulus of nanomaterials: Resonant contact-AFM measurement and reduced-size effects (Invited Paper),” in *Proc. SPIE 5766, Testing, Reliability, and Application of Micro- and Nano-Material Systems III*, pp. 78–89, 2005, doi: 10.1117/12.604981.
- [228] C. T. Sun and H. Zhang, “Size-dependent elastic moduli of platelike nanomaterials,” *J. Appl. Phys.*, vol. 93, pp. 1212–1218, 2003, doi: 10.1063/1.1530365.
- [229] A. N. Alizada and A. H. Sofiyev, “Modified Young’s moduli of nanomaterials taking into account the scale effects and vacancies,” *Meccanica*, vol. 46, pp. 915–920, 2011, doi: 10.1007/s11012-010-9349-1.
- [230] H. Yang, B. Wang, and L. Ma, “Designing hierarchical metamaterials by topology analysis with tailored Poisson’s ratio and Young’s modulus,” *Compos. Struct.*, vol. 214, pp. 359–378, 2019, doi: 10.1016/j.compstruct.2019.01.076.
- [231] X. Yu, J. Zhou, H. Liang, Z. Jiang, and L. Wu, “Mechanical metamaterials associated with stiffness, rigidity and compressibility: A brief review,” *Prog. Mater. Sci.*, vol. 94, pp. 114–173, 2018, doi: 10.1016/j.pmatsci.2017.12.003.
- [232] F. Lin, Y. Xiang, and H. S. Shen, “Tunable positive/negative Young’s modulus in graphene-based metamaterials,” *Adv. Theory Simul.*, vol. 4, no. 5, p. 1900289, 2021, doi: 10.1002/adts.202000130.
- [233] A. A. Zadpoor, “Mechanical metamaterials,” *Mater. Horiz.*, vol. 3, pp. 371–381, 2016, doi: 10.1039/C6MH00065G.
- [234] H. H. Huang and C. T. Sun, “Theoretical investigation of the behavior of an acoustic metamaterial with extreme Young’s modulus,” *J. Mech. Phys. Solids*, vol. 59, pp. 2070–2081, 2011, doi: 10.1016/j.jmps.2011.07.002.
- [235] I. N. Levine, *Química Cuántica*, 5th ed., New York: Prentice Hall, 2001.
- [236] S. Manzhos, “Machine learning for the solution of the Schrödinger equation,” *Mach. Learn. Sci. Technol.*, vol. 1, no. 1, p. 013002, 2020, doi: 10.1088/2632-2153/ab7d30.

- [237] D. Pfau, J. S. Spencer, A. G. D. G. Matthews, and W. M. C. Foulkes, “Ab initio solution of the many-electron Schrödinger equation with deep neural networks,” *Phys. Rev. Res.*, vol. 2, no. 3, p. 033429, 2020, doi: 10.1103/PhysRevResearch.2.033429.
- [238] A. G. Vázquez, *Modelación a partir de principios fundamentales de las perovskitas  $\text{Na}_{0.5}\text{Bi}_{0.5}\text{TiO}_3$  y  $\text{BiFeO}_3$* , Tesis de Maestría, Centro de Investigación en Materiales Avanzados (CIMAV), 2016
- [239] S. Pereira, *Análisis y diseño de antena leaky-wave CRLH y de superficie selectiva en frecuencia para el control de los campos radiados*, Tesis Doctoral, Univ. Politécnica de Cartagena, 2013
- [240] R. I. Eglitis, “Ab initio hybrid DFT calculations of  $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{PbTiO}_3$ ,  $\text{SrZrO}_3$  and  $\text{PbZrO}_3$  (111) surfaces,” *Appl. Surf. Sci.*, vol. 358, pp. 556–562, 2015, doi: 10.1016/j.apsusc.2015.08.010.
- [241] A. A. Emery and C. Wolverton, “High-throughput DFT calculations of formation energy, stability and oxygen vacancy formation energy of  $\text{ABO}_3$  perovskites,” *Sci. Data*, vol. 4, p. 170153, 2017, doi: 10.1038/sdata.2017.153.
- [242] M. Yu, S. Yang, C. Wu, and N. Marom, “Machine learning the Hubbard U parameter in DFT+U using Bayesian optimization,” *NPJ Comput. Mater.*, vol. 6, p. 66, 2020, doi: 10.1038/s41524-020-00446-9.
- [243] M. Wang et al., “Radical-mediated C–C cleavage of unstrained cycloketones and DFT study for unusual regioselectivity,” *Nat. Commun.*, vol. 11, p. 1869, 2020, doi: 10.1038/s41467-020-14435-5.
- [244] M. Bogojeski et al., “Quantum chemical accuracy from density functional approximations via machine learning,” *Nat. Commun.*, vol. 11, p. 5223, 2020, doi: 10.1038/s41467-020-19093-1.
- [245] M. Arteaga-Varela, “Optimización estructural de la perovskita de zirconato de estroncio: Un estudio a primeros principios,” *Rev. Padi UAEH.*, vol. 7, pp. 88–92, 2019, doi: 10.29057/icbi.v7iEspecial 2.4939.
- [246] J. S. Smith et al., “Automated discovery of a robust interatomic potential for aluminum,” *Nat. Commun.*, vol. 11, p. 5341, 2020, doi: 10.1038/s41467-021-21376-0.
- [247] J. Tomeček and P. Bouř, “Density functional computations of vibrational circular dichroism spectra beyond the Born–Oppenheimer approximation,” *J. Chem. Theory Comput.*, vol. 16, pp. 2627–2634, 2020, doi: 10.1021/acs.jctc.0c00081.
- [248] M. Nottoli, B. Mennucci, and F. Lipparini, “Excited state Born–Oppenheimer molecular dynamics through coupling between time-dependent DFT and AMOEBA,” *Phys. Chem. Chem. Phys.*, vol. 22, pp. 19532–19541, 2020, doi: 10.1039/D0CP03688A.

- [249] P. Schwerdtfeger, "The pseudopotential approximation in electronic structure theory," *ChemPhysChem*, vol. 12, pp. 3143–3155, 2011, doi: 10.1002/cphc.201100387.
- [250] A. M. Rappe, K. M. Rabe, E. Kaxiras, and J. D. Joannopoulos, "Optimized pseudopotentials," *Phys. Rev. B*, vol. 41, 1990, doi: 10.1103/PhysRevB.41.1227.
- [251] P. Borlido, J. Doumont, F. Tran, M. A. L. Marques, and S. Botti, "Validation of Pseudopotential Calculations for the Electronic Band Gap of Solids," *J. Chem. Theory Comput.*, vol. 16, pp. 3620–3627, 2020, doi: 10.1021/acs.jctc.0c00214.
- [252] L.-W. Wang and A. Zunger, "Local-density-derived semiempirical pseudopotentials," *Phys. Rev. B*, vol. 8, 1995, doi: 10.1103/PhysRevB.51.17398.
- [253] G. Ortiz, "Gradient-corrected pseudopotential calculations in semiconductors," *Phys. Rev. B*, vol. 45, 1992, doi: 10.1103/PhysRevB.45.11328.
- [254] R. Robles, J. Izquierdo, A. Vega, and L. C. Balbás, "All-electron and pseudopotential study of the spin-polarization of the V(001) surface: LDA versus GGA," *Phys. Rev. B Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 63, 2001, doi: 10.1103/PhysRevB.63.172406.
- [255] G. Ortiz and P. Ballone, "Pseudopotentials for non-local-density functionals," *Phys. Rev. B*, vol. 8, 1990, doi: 10.1103/PhysRevB.43.6376.
- [256] Y.-M. Juan, E. Kaxiras, and R. G. Gordon, "Use of the generalized gradient approximation in pseudopotential calculations of solids," *Phys. Rev. B*, vol. 51, 1994, doi: 10.1103/PhysRevB.51.9521.
- [257] M. Fuchs, J. L. F. Da Silva, C. Stampfl, J. Neugebauer, and M. Scheffler, "Cohesive properties of group-III nitrides: A comparative study of all-electron and pseudopotential calculations using the generalized gradient approximation," *Phys. Rev. B Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 65, pp. 2452121–24521213, 2002, doi: 10.1103/PhysRevB.65.245212.
- [258] N. A. Akil, "Length dependent thermal conductivity of silicon and copper nanowire: a molecular dynamics study," *Mol. Cryst. Liq. Cryst.*, vol. 768, pp. 132–142, 2024, doi: <https://doi.org/10.1080/15421406.2023.2243691>.
- [259] R. Añez, M. A. San-Miguel, and J. F. Sanz, "Study of the TiSi interface formed by Ti deposition on a clean Si (100) surface: A periodic DFT study," *Surf. Sci.*, vol. 606, pp. 754–761, 2012, doi: 10.1016/j.susc.2012.01.006.
- [260] S. Sharma, A. S. Verma, B. K. Sarkar, R. Bhandari, and V. K. Jindal, "First principles study on the elastic and electronic properties of CdX (X=S, Se and Te)," *AIP Conf. Proc.*, vol. 1393, pp. 229–230, 2011, doi: 10.1063/1.3653693.

- [261] S. Sharma, P. Rani, A. S. Verma, and V. K. Jindal, "Structural and electronic properties of sulphur-doped boron nitride nanotubes," *Solid State Commun.*, vol. 152, pp. 802–805, 2012, doi: 10.1016/j.ssc.2012.01.038.
- [262] A. Floris et al., "Hubbard-corrected density functional perturbation theory with ultrasoft pseudopotentials," *Phys. Rev. B*, vol. 101, 2020, doi: 10.1103/PhysRevB.101.064305.
- [263] P. J. Hasnip and C. J. Pickard, "Electronic energy minimisation with ultrasoft pseudopotentials," *Comput. Phys. Commun.*, vol. 174, pp. 24–29, 2006, doi: 10.1016/j.cpc.2005.07.011.
- [264] G. Kresse and D. Joubert, "From ultrasoft pseudopotentials to the projector augmented-wave method," *Phys. Rev. B*, vol. 59, pp. 1758–1775, 1999, doi: 10.1103/PhysRevB.59.1758.
- [265] A. Dal Corso, A. Pasquarello, and A. Baldereschi, "Density-functional perturbation theory for lattice dynamics with ultrasoft pseudopotentials," *Phys. Rev. B*, vol. 56, no. 17, pp. R11369–R11372, Nov. 1997, doi: 10.1103/PhysRevB.56.R11369.
- [266] K. Laasonen, R. Car, C. Lee, and D. Vanderbilt, "Implementation of ultrasoft pseudopotentials in ab initio molecular dynamics," *Phys. Rev. B*, vol. 43, 1991, doi: 10.1103/PhysRevB.43.6796.
- [267] J. A. Moriarty, "Density-functional formulation of the generalized pseudopotential theory," *Phys. Rev. B*, vol. 16, pp. 2537–2545, 1977, doi: 10.1103/PhysRevB.16.2537.
- [268] Y. Yang et al., "Range-separated hybrid functional pseudopotentials," *Phys. Rev. B*, vol. 108, 2023, doi: 10.1103/PhysRevB.108.165142.
- [269] J. H. Skone, M. Govoni, and G. Galli, "Self-consistent hybrid functional for condensed systems," *Phys. Rev. B Condens. Matter Mater. Phys.*, vol. 89, 2014, doi: 10.1103/PhysRevB.89.195112.
- [270] J. Yang, L. Z. Tan, and A. M. Rappe, "Hybrid functional pseudopotentials," *Phys. Rev. B*, vol. 97, 2018, doi: 10.1103/PhysRevB.97.085130.
- [271] Q. Fu, T. He, J. L. Li, and G. W. Yang, "Band-engineered SrTiO<sub>3</sub> nanowires for visible light photocatalysis," *J. Appl. Phys.*, vol. 112, 2012, doi: 10.1063/1.4767229.
- [272] A. V. Bandura, R. A. Evarestova, and Y. F. Zhukovskii, "Energetic stability and photocatalytic activity of SrTiO<sub>3</sub> nanowires: ab initio simulations," *RSC Adv.*, vol. 5, no. 29, pp. 24115–24125, 2015. doi: 10.1039/C5RA00306G.
- [273] W. G. Sawyer, N. Argibay, D. L. Burriss, and B. A. Krick, "Mechanistic studies in friction and wear of bulk materials," *Annu. Rev. Mater. Res.*, vol. 44, pp. 395–427, 2014, doi: 10.1146/annurev-matsci-070813-113533.
- [274] L. Voorhaar and R. Hoogenboom, "Supramolecular polymer networks: Hydrogels and bulk materials," *Chem. Soc. Rev.*, vol. 45, pp. 4013–4031, 2016, doi: <https://doi.org/10.1039/C6CS00130K>.

- [275] T. Zheng, J. Wu, D. Xiao, and J. Zhu, "Recent development in lead-free perovskite piezoelectric bulk materials," *Prog. Mater. Sci.*, vol. 98, pp. 552–624, 2018, doi: 10.1016/j.pmatsci.2018.06.002.
- [276] J. Lloyd-Hughes and T. I. Jeon, "A review of the terahertz conductivity of bulk and nano-materials," *J. Infrared Millim. Terahertz Waves*, vol. 33, pp. 871–925, 2012, doi: 10.1007/s10762-012-9905-y.
- [277] J. J. Kruzic, "Bulk Metallic Glasses as Structural Materials: A Review," *Adv. Eng. Mater.*, vol. 18, pp. 1308–1331, 2016, doi: 10.1002/adem.201600066.
- [278] H. Alam and S. Ramakrishna, "A review on the enhancement of figure of merit from bulk to nano-thermoelectric materials," *Nano Energy*, vol. 2, pp. 190–212, 2013, doi: <https://doi.org/10.1016/j.nanoen.2012.10.005>
- [279] C. Kittel, *Introducción a la Física del Estado Sólido*, Editorial Reverté, Barcelona, 2003.
- [280] J. M. Zuo, "New method of Bravais lattice determination," *Phys. Rev. B*, vol. 52, 1993, doi: 10.1016/0304-3991(93)90061-2.
- [281] A. S. Disa, T. F. Nova, and A. Cavalleri, "Engineering crystal structures with light," *Nat. Phys.*, vol. 17, pp. 1087–1092, 2021, doi: 10.1038/s41567-021-01366-1.
- [282] H. D. Flack, "The revival of the Bravais lattice," *Acta Crystallogr. A Found. Adv.*, vol. 71, pp. 141–142, 2015.
- [283] J. M. Zuo, "New method of Bravais lattice determination," *Phys. Rev. B*, vol. 52, 1993, doi: 10.1016/0304-3991(93)90061-2.
- [284] D. Xue and S. Zhang, "Chemical bond analysis of the correlation between crystal structure and nonlinear optical properties of complex crystals," *J. Phys. Chem. Solids*, vol. 262, 1999, doi: 10.1016/S0921-4526(98)00465-7.
- [285] A. Van De Walle, "A complete representation of structure-property relationships in crystals," *Nat. Mater.*, vol. 7, pp. 455–458, 2008, doi: 10.1038/nmat2200.
- [286] . Bernstein, "Crystal growth, polymorphism and structure-property relationships in organic crystals," *Cryst. Growth Des.*, vol. 26, 1993, doi: 10.1088/0022-3727/26/8B/010.
- [287] Y. Q. Cheng and E. Ma, "Atomic-level structure and structure-property relationship in metallic glasses," *Prog. Mater. Sci.*, vol. 56, pp. 379–473, 2011, doi: 10.1016/j.pmatsci.2010.12.002.

## **Anexos**

### **A. Información complementaria.**

#### **Materiales Sólidos Cristalinos**

Los materiales en bulto son fundamentales para entender las propiedades físicas y mecánicas de los sólidos. Estos materiales constituyen la base para el desarrollo y diseño de nuevos materiales, y el estudio de sus propiedades nos permite comprender las respuestas estructurales y funcionales que subyacen en aplicaciones críticas, desde la ingeniería estructural hasta la microelectrónica.

Estos materiales se definen generalmente como aquellos cuyo comportamiento y propiedades físicas no están afectados por restricciones de tamaño o confinamiento espacial. En este estado, el material presenta un equilibrio entre la contribución de sus átomos interiores y aquellos en la superficie, donde la proporción de átomos en la superficie es despreciable en comparación con los del volumen total. Este fenómeno permite que los materiales en bulto posean una estructura cristalina y propiedades mecánicas, térmicas y electrónicas bien definidas y homogéneas, características que pueden analizarse mediante teorías de sólidos clásicos.

La importancia de los materiales en bulto radica en su rol de referencia para otros sistemas de materiales, como los materiales nanoestructurados, los cuales muestran alteraciones en sus propiedades en función del tamaño. El estudio de materiales en bulto proporciona una base esencial para entender el comportamiento mecánico y electrónico en sistemas tridimensionales donde las interacciones de borde y de superficie son mínimas. Por esta razón, su investigación es crítica en el diseño y optimización de aplicaciones industriales, que requieren una estabilidad y homogeneidad en sus propiedades a escala macroscópica.

En el estudio de los materiales en bulto y de sus propiedades macroscópicas se encuentra estrechamente relacionado con su estructura cristalina subyacente, la cual define el orden y la disposición periódica de los átomos en el espacio. Este ordenamiento cristalino es esencial para comprender fenómenos como la conductividad térmica, las propiedades mecánicas y la respuesta electrónica de los materiales. Por ejemplo, los materiales metálicos con estructuras cúbicas centradas

en el cuerpo (BCC) o cúbicas centradas en las caras (FCC) exhiben características mecánicas específicas, como la ductilidad y la resistencia a la tracción, que los hacen altamente funcionales en aplicaciones estructurales[273–278]. De esta forma, el análisis de las redes cristalinas en materiales en bulto permite una conexión directa entre su estructura atómica y su comportamiento macroscópico, facilitando el diseño y optimización de materiales para aplicaciones industriales avanzadas. Las estructuras cristalinas se clasifican en catorce sistemas diferentes, conocidos como redes de Bravais, que describen todas las posibles disposiciones geométricas de los átomos en un cristal. [279].

Las catorce redes de Bravais representan las posibles configuraciones tridimensionales de celdas unitarias que se repiten periódicamente para llenar el espacio siendo un marco fundamental para comprender la estructura de los materiales cristalinos. Estas redes de Bravais surgen de las combinaciones posibles de sistemas cristalinos (cúbico, tetragonal, ortorrómbico, hexagonal, trigonal, monoclinico y triclínico) y los tipos de celda unitaria (primitiva, centrada en el cuerpo, centrada en las caras y centrado en las bases. Cada red posee un conjunto único de características y simetrías cristalográficas que definen no solo la organización de los átomos en el espacio, sino que también influyen de manera directa en las propiedades físicas y funcionales del material, como sus propiedades mecánicas, ópticas, térmicas y electrónicas[280–283].

Estas simetrías y disposiciones en cada red de Bravais determinan la manera en la que el material responde a estímulos externos, como la presión, el campo magnético y la temperatura. Un ejemplo, en materiales con estructura cúbica, la simetría permite una propagación uniforme de ondas acústicas y térmicas, lo que facilita una alta conductividad térmica, como es el caso de los metales. Por el contrario, en estructuras con menor simetría, como las ortorrómbicas o triclínicas, la conductividad térmica y eléctrica puede variar significativamente en diferentes direcciones, introduciendo anisotropía en sus propiedades, lo cual es un aspecto crucial en aplicaciones de dispositivos electrónicos y térmicos especializados.

La Figura 5.1 ilustra las catorce configuraciones cristalinas de redes de Bravais, proporcionando una representación visual de estas disposiciones geométricas

fundamentales. Comprender las configuraciones cristalinas abre la puerta a la ingeniería de materiales avanzados, tales como metamateriales o nanomateriales, que, mediante el ajuste preciso de sus estructuras a nanoescala, pueden diseñarse para exhibir propiedades específicas y no observadas en materiales convencionales, como una respuesta óptica controlada o una capacidad excepcional de disipación térmica.

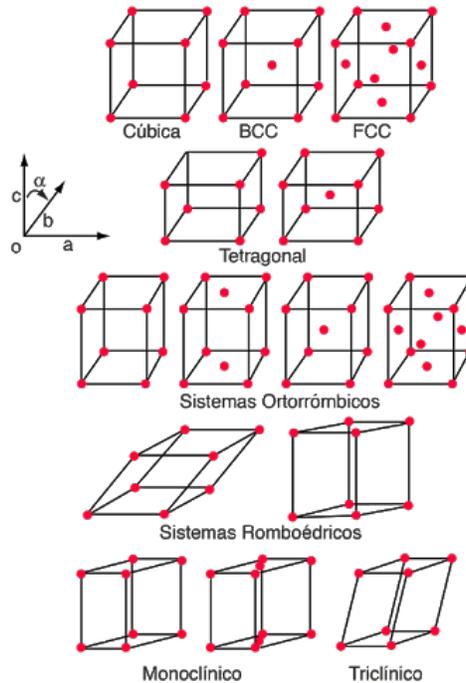


Figura 5.1 Estructuras cristalinas (Redes de Bravais)[16].

A nivel estructural, el arreglo de los átomos afecta de manera significativa las propiedades del material a escalas macroscópicas. La simetría y el tipo de red determinan la conductividad eléctrica, influenciando la movilidad de electrones y de huecos en semiconductores, mientras que la estructura cristalina afecta la dureza y la resistencia mecánica mediante el mecanismo de deslizamiento en las dislocaciones. Además, la estabilidad térmica de los materiales está fuertemente influenciada por el tipo de red, ya que algunas configuraciones permiten un empaquetamiento más denso de átomos, reduciendo la energía libre y aumentando la resistencia a la deformación térmica. Por lo tanto, el estudio detallado de las redes de Bravais y sus implicancias estructurales es fundamental para el diseño racional

de nuevos materiales con propiedades optimizadas para aplicaciones específicas en campos como la electrónica, la óptica y la ingeniería de materiales[284–287].

La comprensión de la estructura cristalina de los materiales en bulto, como se describe a través de las redes de Bravais, han establecido una base esencial para explorar nuevas fronteras en ciencia de materiales, especialmente en el campo de los nanomateriales. Al reducir las dimensiones del material a la escala nanométrica, surgen efectos únicos derivados de la organización atómica que no se manifiestan en estructuras macroscópicas. Los materiales, con dimensiones en el rango de 1 a 100 nanómetros, se caracterizan por una elevada relación superficie-volumen y por la aparición de efectos cuánticos que alteran radicalmente sus propiedades físicas. Estas características permiten manipular con precisión propiedades electrónicas, ópticas y mecánicas que dependen no solo de la estructura interna, sino también de la configuración superficial del material.

En el presente estudio, además del pseudopotencial PBE, se realizaron cálculos empleando los pseudopotenciales BLYP y PBESOL dentro del paquete computacional Quantum ESPRESSO, con el objetivo de comparar los resultados y confirmar la elección del pseudopotencial óptimo, siendo finalmente seleccionado y empleado para el desarrollo de los sistemas de SrZrO<sub>3</sub> el PBE por su mejor ajuste a los parámetros estructurales esperados. Los resultados detallados de la optimización de estructura obtenidos con los pseudopotenciales BLYP y PBESOL se presentan en el Anexo B.

## **B. Optimización pseudopotencial BLYP**

Dentro del presente trabajo se han empleado dos pseudopotenciales más, diferentes al PBE (rrkjus) que proporciona los resultados antes analizados, en esta sección se añadirán las tablas y gráficas correspondientes al ajuste de .

En la Tabla B.1 se observan los datos correspondientes a la optimización de la función de onda de prueba para un pseudopotencial PBE (rrkjus), donde a una energía de 80 Ry se aprecia que la energía con respecto a los siguientes valores de Meshcutoff es despreciable.

Tabla 5.1 Ajuste del Meshcutoff para un pseudopotencial BLYP

Pseudopotencial BLYP			
Meshcutoff (Ry)	Energía total (eV)	Meshcutoff (Ry)	Energía total (eV)
20	-481.48913753	220	-500.21830412
40	-492.81949989	240	-500.707340
60	-496.43416927	260	-500.23210705
80	-498.27463987	280	-500.23484198
100	-499.26448421	300	-500.23606648
120	-499.74593550	320	-500.23688625
140	-499.98619145	340	-500.23723516
160	-500.10734439	360	-500.23923783
180	-500.16909817	380	-500.23817174
200	-500.20029341	400	-500.23827195

De igual forma en la Figura 5.2 se observa de forma gráfica estos datos mostrados en la Tabla 5.1, donde se puede observar con mayor claridad que a partir de 120 Ry la energía converge, haciendo que la gráfica tienda a un comportamiento lineal.

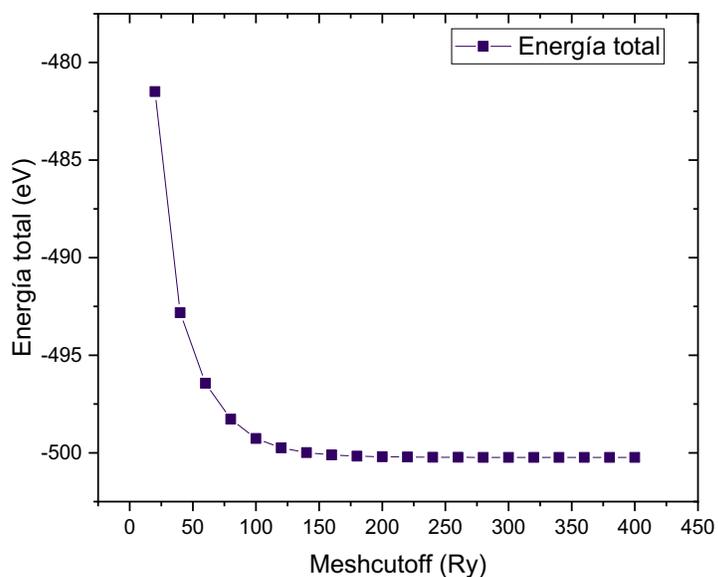


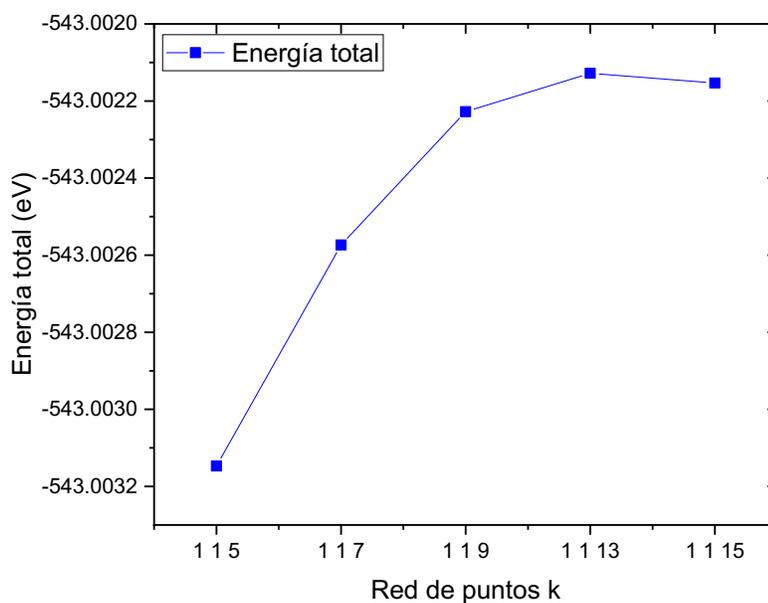
Figura 5.2 Optimización del Meshcutoff

Posterior a la determinación de la función de onda, se realizó el ajuste de la red de puntos de alta simetría obteniendo los resultados presentados en la Tabla 5.2, siendo en una malla de 1x1x13 donde la energía con respecto a los siguientes es más estable.

*Tabla 5.2 Ajuste de puntos de k*

<b>Red de puntos K</b>	<b>Energía total (eV)</b>
5	-499.40936751
7	-499.40889190
9	-499.40848475
<b>13</b>	<b>-499.40793809</b>
15	-499.40818034

La Figura 5.3 muestra de forma gráfica el comportamiento de la energía al realizar este ajuste, mostrando menor variación en su energía posterior a la red de 13 puntos K.



*Figura 5.3 Ajuste red de puntos K*

Posterior en la Tabla 5.3 se muestran los resultados de la optimización geométrica del sistema, para el pseudopotencial BLYP, donde se aprecia que la mínima energía (sistema en equilibrio) se encuentra a 4.189 Å.

*Tabla 5.3 Optimización geométrica con pseudopotencial BLYP*

<b>Pseudopotencial blyp</b>	
Parámetro de red (Å)	Energía total
3.8890	-499.5087929509
3.9890	-499.5180127577
4.0890	-499.5196319882
<b>4.1890</b>	<b>-499.5231192943</b>
4.2890	-499.5220854060

En la Figura 5.4 con el fin de visualizar de manera clara la tendencia del sistema hacia el equilibrio, se presenta la gráfica correspondiente a los datos de la Tabla 5.3, en la que se muestra la energía total en función del parámetro de red. En el eje X se representa el parámetro de red (en Å) y en el eje Y la energía total (en Ry). Como se observa en la gráfica, la energía mínima se alcanza alrededor de 4.189 Å, lo que confirma que este valor corresponde al estado de menor energía y, por tanto, a la estructura optimizada más estable al emplear el pseudopotencial BLYP.

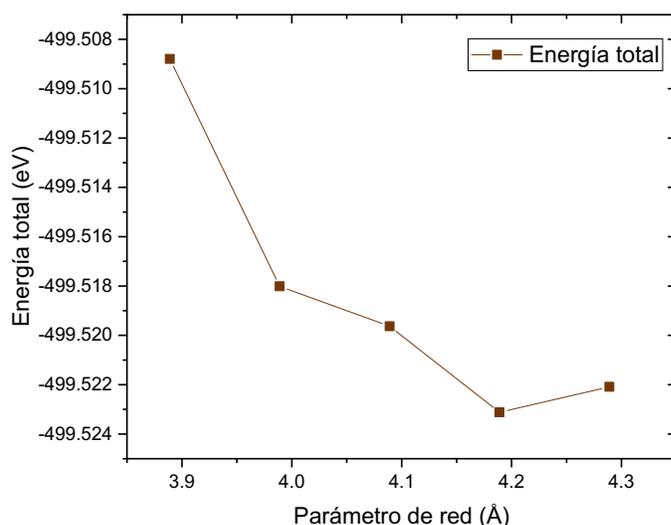


Figura 5.4 Optimización geométrica (relajamiento del sistema)

### B1. Optimización pseudopotencial PBESOL PAW

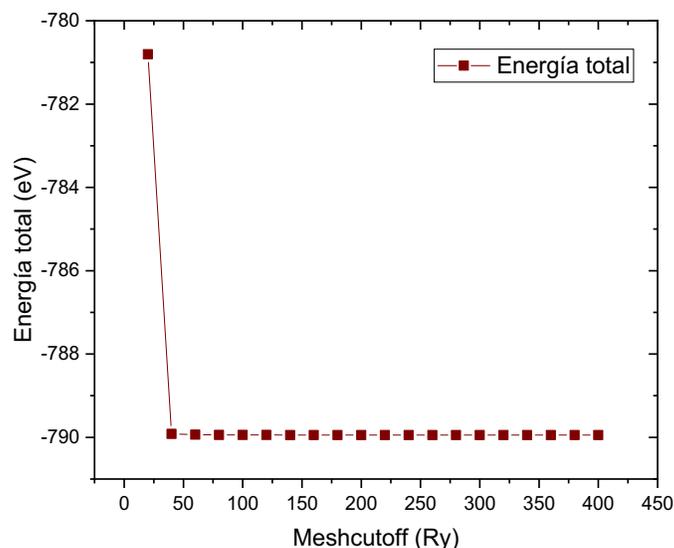
A continuación, siguiendo una metodología similar a la aplicada con el pseudopotencial BLYP, se realizó la optimización de la función de onda de prueba empleando un pseudopotencial tipo PBE (pbesol paw). En la Tabla 5.4 se muestran los resultados obtenidos, donde se puede observar la variación de la energía total en función del valor del parámetro *meshcutoff*. Se identifica que a 60 Ry se alcanza una energía suficientemente estable, lo que permite seleccionar este valor como óptimo para los cálculos posteriores, equilibrando precisión y costo computacional.

Tabla 5.4 Optimización de la función de onda de prueba PBE (pbesol paw)

Pseudopotencial PBE (pbesol paw)			
Meshcutoff (Ry)	Energía total (eV)	Meshcutoff (Ry)	Energía total (eV)
20	-780.80208690	<b>220</b>	-789.94363009
<b>40</b>	-789.91709580	<b>240</b>	-789.94364381
<b>60</b>	<b>-789.93569471</b>	<b>260</b>	-789.94368405
<b>80</b>	-789.94170027	<b>280</b>	-789.94369160
<b>100</b>	-789.94254508	<b>300</b>	-789.94368862
<b>120</b>	-789.94318936	<b>320</b>	-789.94370585
<b>140</b>	-789.94337145	<b>340</b>	-789.94371435

<b>160</b>	-789.94347868	<b>360</b>	-789.94371378
<b>180</b>	-789.94353725	<b>380</b>	-789.94371733
<b>200</b>	-789.94362034	<b>400</b>	-789.94372053

De manera complementaria, en la Figura 5.5 se presenta la gráfica que ilustra la convergencia de la energía total en función del valor de *meshcutoff*. Esta representación visual permite observar cómo, a partir de los 60 Ry, la energía comienza a estabilizarse, confirmando que dicho valor es adecuado para garantizar la precisión de los cálculos sin incurrir en un costo computacional innecesario.



*Figura 5.5 Gráfica optimización Meshcutoff*

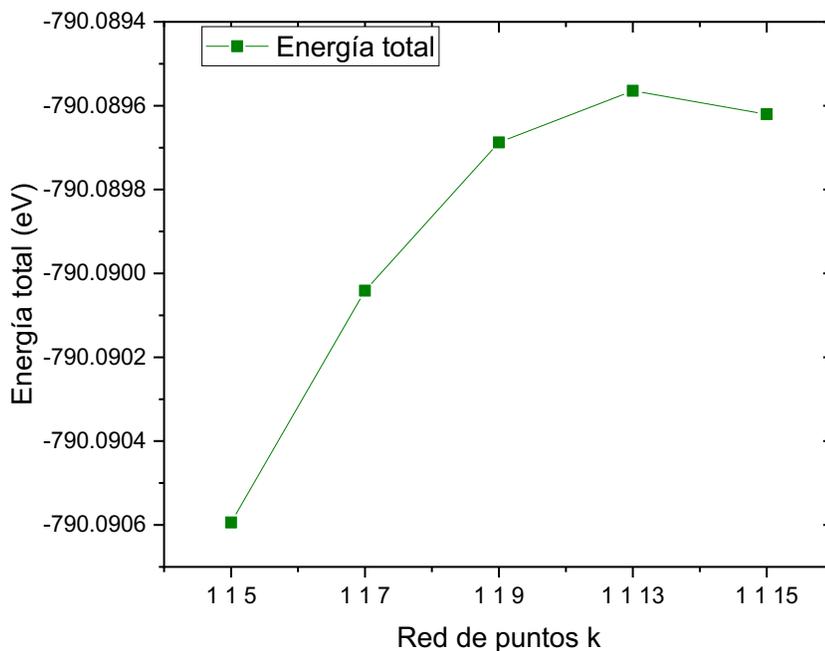
Posteriormente, en la Tabla 5.5 se presentan los resultados del ajuste de la red de puntos en la zona de alta simetría, donde se evaluó la energía total del sistema con diferentes cantidades de puntos K. Se determinó que la malla  $1 \times 1 \times 13$  proporciona un valor óptimo, al mostrar una energía suficientemente convergente con respecto a configuraciones más densas.

*Tabla 5.5 Ajuste puntos de alta simetría*

<b>Número de puntos K</b>	<b>Energía total (eV)</b>

5	-499.40936751
7	-499.40889190
9	-499.40848475
13	-499.40793809
15	-499.40818034

Asimismo, en la Figura 5.6 se muestra de forma gráfica la variación de la energía total en función del número de puntos K, permitiendo visualizar claramente la tendencia hacia la convergencia y respaldando la elección de la malla  $1 \times 1 \times 13$  como la más adecuada para los cálculos posteriores.



*Figura 5.6 Ajuste red de puntos K*

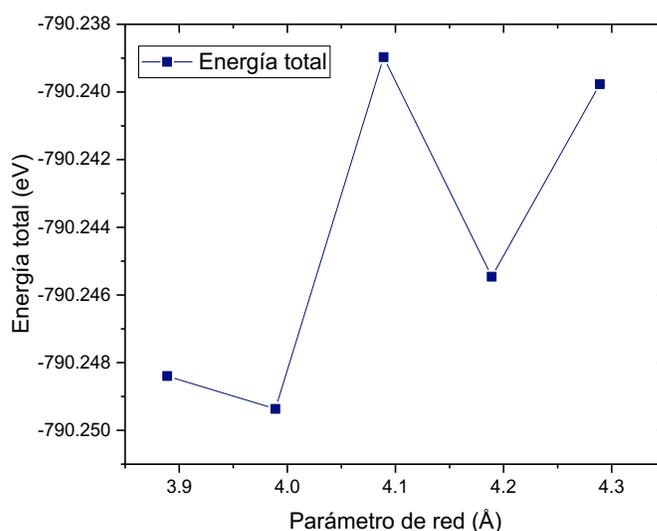
A continuación, en la Tabla 5.6 se muestran los resultados de la optimización geométrica empleando el pseudopotencial PBE (pbesol paw), donde se evaluó la energía total del sistema en función del parámetro de red. Se identificó que el valor

mínimo de energía se alcanza alrededor de 3.98 Å, lo que indica que esta es la configuración estructural más estable bajo este enfoque.

*Tabla 5.6 Optimización geométrica para un pseudopotencial PBE (pbesol paw)*

<b>Pseudopotencial PBE (pbesol paw)</b>	
Parámetro de red (Å)	Energía total
3.8890	-790.2483942049
<b>3.9890</b>	<b>-790.2493654747</b>
4.0890	-790.2389700520
4.1890	-790.2454615533
4.2890	-790.2397686934

Complementariamente, la Figura 5.7 representa gráficamente el comportamiento de la energía total conforme varía el parámetro de red. En dicha figura puede apreciarse una tendencia no completamente monótona, lo cual resalta un comportamiento particular del sistema, pero permite identificar claramente el punto de energía mínima asociado a la estructura optimizada.



*Figura 5.7 Optimización geométrica del sistema en función de la energía*

Dentro del código de Quantum Espresso el uso de pseudopotenciales de tipo ultrasuave como los presentados en este apartado están limitados para realizar cálculo de las propiedades ópticas, es por lo que se optó por el empleo del pseudopotencial Blyp que si permite la determinación de estas propiedades y por ello es del cual se presentan los resultados en el capítulo III.

## C. Programa para cálculo de Modulo de Young

### C1. Lectura y Preparación de Datos

Se cargaron los datos desde un archivo llamado bd3.dat. Este archivo contiene dos columnas: la primera corresponde a los valores del parámetro de red, en Ångströms (Å), y la segunda contiene las energías totales en electronvoltios (eV). Los datos fueron leídos y almacenados en arrays utilizando np.loadtxt, omitiendo la primera fila (que es un encabezado).

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from scipy.optimize import curve_fit

# Cargar los datos del archivo
data = np.loadtxt("bd3.dat", skiprows=1) # Ignorar la primera
fila si es un encabezado
a = data[:, 0] # Parámetro de red a (Å)
energy = data[:, 1] # Energía total (eV)
```

### C2. Ajuste Polinómico de los Datos

En este caso, el sistema se considera unidimensional (1D), por lo que no es necesario realizar un cálculo complejo como en sistemas bidimensionales o tridimensionales. La longitud inicial  $L_0$  se toma directamente como el valor del parámetro de red  $a$  en unidades de Ångströms.

```
# Calcular la longitud inicial  $L_0$  (asumiendo una estructura 1D)
# Para un sistema 1D, no necesitamos un cálculo complejo como en
el caso 2D
def calcular_longitud(a):
    return a # En 1D, simplemente consideramos a como la longitud

a0 = a[len(a) // 2] # Seleccionar el valor central del parámetro
de red
L0_angstrom = calcular_longitud(a0) # Longitud inicial en Å
```

### C3. Ajuste Polinómico de Datos

Para modelar la relación entre el parámetro de red y la energía total, se empleó un ajuste polinómico de segundo grado. La función utilizada en este ajuste es la siguiente:

$$E(a) = a_0 + a_1a + a_2a^2$$

Este ajuste se realizó con la función `curve_fit` de la biblioteca `scipy.optimize`, que devuelve los parámetros del polinomio ajustado.

```
# Definir una función polinómica para el ajuste
```

```
def polynomial(a, a0, a1, a2):
```

```
    return a0 + a1 * a + a2 * a**2
```

```
# Ajustar los datos de energía con un polinomio de segundo grado
```

```
params, _ = curve_fit(polynomial, a, energy)
```

### C4. Cálculo del Módulo de Young

El módulo de Young se calcula a partir de la segunda derivada de la energía con respecto al parámetro de red. Esta derivada es simplemente:

$$\frac{d^2E}{da^2} = 2a_2$$

El módulo de Young se obtiene multiplicando esta segunda derivada por un factor de conversión específico.

```
# Calcular la segunda derivada respecto al parámetro de red (a)
d2E_da2 = 2 * params[2] # Segunda derivada de la energía respecto
a a
```

```
# Calcular el módulo de Young (N/m) usando el factor de conversión
directamente
```

```
Ys_Nm = d2E_da2 * 16.02 # Multiplicar directamente por el factor
de conversiónE_GPa = E_eV_per_A3 * eV_per_A3_to_GPa
```

## C5. Visualización de Resultados

Se generaron dos gráficos: uno en español y otro en inglés, mostrando tanto los datos experimentales como el ajuste polinómico realizado. Los gráficos permiten visualizar la relación entre el parámetro de red y la energía total.

```
# Graficar los datos y el ajuste en español
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.scatter(a, energy, label='Datos', color='blue')
plt.plot(a, polynomial(a, *params), label='Ajuste polinómico',
color='red')
plt.xlabel('Parámetro de red (Å)')
plt.ylabel('Energía total (eV)')
plt.legend()
plt.title('Ajuste de energía vs parámetro de red')
plt.grid(True)
plt.savefig('ajuste_energia_espanol.png')
plt.show()
```

```
# Graficar los datos y el ajuste en inglés
plt.figure(figsize=(8, 6))
plt.scatter(a, energy, label='Data', color='blue')
plt.plot(a, polynomial(a, *params), label='Polynomial fit',
color='red')
plt.xlabel('Lattice parameter (Å)')
plt.ylabel('Total energy (eV)')
plt.legend()
plt.title('Energy vs Lattice parameter fit')
plt.grid(True)
plt.savefig('energy_fit_english.png')
plt.show()
```

Se presentan los resultados de la longitud inicial  $L_0$ , la segunda derivada de la energía respecto al parámetro de red, y el valor ajustado del módulo de Young en unidades de  $N/m$ .

```
# Mostrar los resultados
print(f"Longitud inicial  $L_0$  (Å): {L0_angstrom:.4f}")
print(f"Segunda derivada  $d^2E/da^2$  (eV/Å2): {d2E_da2:.4f}")
print(f"Módulo de Young ajustado (N/m): {Ys_Nm:.4f}")
```

Este enfoque permite calcular el módulo de Young para un sistema 1D a partir de los datos experimentales, proporcionando una representación visual clara tanto en español como en inglés para su interpretación.

Posteriormente se procedió a calcular el coeficiente de Poisson mediante el tensor de estrés de los sistemas de estudio, mediante el siguiente procedimiento.

#### **D. Cálculo del coeficiente de Poisson a partir del tensor de estrés.**

En este apartado, se describe la metodología empleada para calcular el coeficiente de Poisson utilizando los datos del tensor de estrés obtenidos de un archivo de salida de simulaciones. El coeficiente de Poisson es una propiedad mecánica fundamental que describe la relación entre las deformaciones transversales y longitudinales en un material sometido a una carga uniaxial.

##### **D1. Lectura del Tensor de Estrés**

El tensor de estrés se lee desde un archivo denominado NW.dat. Este archivo contiene las componentes del tensor de estrés calculado en las simulaciones. La función `leer_tensor_estres` se encarga de extraer estas componentes y almacenarlas en una matriz de numpy de 3x3.

```
import numpy as np

# Función para leer el tensor de estrés desde un archivo NW.dat
def leer_tensor_estres(filename):
    with open(filename, 'r') as file:
        lines = file.readlines()
        # Las líneas 2, 3 y 4 contienen el tensor de estrés
        stress_lines = lines[1:4]
        tensor_estres = np.zeros((3, 3))
        for i, line in enumerate(stress_lines):
            values = line.split()
            tensor_estres[i, 0] = float(values[0])
            tensor_estres[i, 1] = float(values[1])
            tensor_estres[i, 2] = float(values[2])
    return tensor_estres
```

La función `leer_tensor_estres` realiza las siguientes tareas:

- **Apertura del Archivo:** Abre el archivo NW.dat en modo de lectura.
- **Lectura de Líneas:** Lee todas las líneas del archivo.
- **Extracción de Datos:** Extrae las líneas correspondientes al tensor de estrés (líneas 2, 3 y 4).

- **Conversión a Matriz:** Convierte los valores de estas líneas a una matriz de numpy de 3x3, representando el tensor de estrés.

## D2. Cálculo del Coeficiente de Poisson

El coeficiente de Poisson se calcula a partir del tensor de estrés asumiendo un estado de tensión uniaxial en la dirección  $xx$ . La función `calcular_coeficiente_poisson` realiza este cálculo.

```
# Función para calcular el coeficiente de Poisson a partir del
# tensor de estrés
def calcular_coeficiente_poisson(tensor_estres):
    # Para este ejemplo, asumimos que tenemos un estado de tensión
    # uniaxial en xx
    sigma_xx = tensor_estres[0, 0]
    sigma_yy = tensor_estres[1, 1]
    sigma_zz = tensor_estres[2, 2]

    # Relación de Poisson, en un estado de estrés uniaxial,
    # deformaciones relativas
    epsilon_yy = sigma_yy / sigma_xx
    epsilon_zz = sigma_zz / sigma_xx

    # Coeficiente de Poisson promedio considerando las direcciones
    # yy y zz
    nu = - (epsilon_yy + epsilon_zz) / 2

    return nu
```

La función `calcular_coeficiente_poisson` realiza los siguientes pasos:

- Extracción de Componentes del Tensor de Estrés: **Obtiene las componentes del tensor de estrés en las direcciones  $xx$ ,  $yy$  y  $zz$ .**
- Cálculo de Deformaciones Relativas: **Calcula las deformaciones relativas en las direcciones  $yy$  y  $zz$  como el cociente de las tensiones correspondientes respecto a la tensión en  $xx$ .**
- Cálculo del Coeficiente de Poisson: **Calcula el coeficiente de Poisson como el promedio negativo de las deformaciones relativas en las direcciones  $yy$  y  $zz$ .**

### D3. Implementación y Resultados

Se implementa el cálculo leyendo el tensor de estrés desde el archivo NW.dat y se calcula el coeficiente de Poisson utilizando las funciones descritas.

```
# Leer el tensor de estrés desde el archivo NW.dat
filename = 'NW.dat'
tensor_estres = leer_tensor_estres(filename)

# Calcular el coeficiente de Poisson
nu = calcular_coeficiente_poisson(tensor_estres)
print(f'Coeficiente de Poisson: {nu:.4f}')
```

La salida del código muestra el valor calculado del coeficiente de Poisson, proporcionando una medida de la deformación transversal relativa a la deformación longitudinal bajo una carga uniaxial.

Este enfoque permite determinar el coeficiente de Poisson de manera precisa a partir de los datos de simulación, contribuyendo a la caracterización mecánica detallada de los materiales estudiados.

### E. Productos

#### E1.1. Reportes técnicos

- 1.1. Brayan Oswaldo Sosa Rosas, realización del Reporte técnico, “Estudio de propiedades en el sistema ferrita de gadolinio; un estudio a primeros principios”, Programa Educativo Ingeniería en Nanotecnología Universidad Tecnológica de Tecámac, División de Procesos Industriales, 7 de enero del 2021 al 23 de abril del 2021, Asesores: Dr. Ventura Rodríguez Lugo y M. en C. Miguel Arteaga Varela
- 1.2. Gustavo Sánchez López, realización del Reporte técnico para obtener el Grado de Ingeniero en Nanotecnología en el área materiales, “Análisis de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del sistema en bulto CsPbBr<sub>3</sub>”, Programa Educativo Ingeniería en Nanotecnología Universidad Tecnológica de Tecámac, División de Procesos Industriales, 7 de enero del

- 2021 al 23 de abril del 2021, Asesores: Dr. Ventura Rodríguez Lugo y M. en C. Miguel Arteaga Varela
- 1.3. Paola Susana Perrusquia Torres, realización del Reporte técnico con el tema, “Determinación de las propiedades electrónicas y ópticas en el sistema  $\text{TiMnO}_3$ ”, Programa Educativo Ingeniería en Nanotecnología Universidad Tecnológica de Tecámac, División de Procesos Industriales, 7 de enero del 2021 al 23 de abril del 2021, Asesores: Dr. Ventura Rodríguez Lugo y M. en C. Miguel Arteaga Varela
  - 1.4. Gerardo Martínez Orea, realización del Reporte técnico con el tema, “Estudio teórico del sistema en bulto de la perovskita  $\text{SrMnO}_3$ ”, Programa Educativo Ingeniería en Nanotecnología Universidad Tecnológica de Tecámac, División de Procesos Industriales, 7 de enero del 2021 al 23 de abril del 2021, Asesores: Dr. Ventura Rodríguez Lugo y M. en C. Miguel Arteaga Varela
  - 1.5. Juan Pablo Sánchez Anaya, realización del Reporte técnico con el tema, “Estudio a primeros principios de propiedades en la perovskita ferrita de bismuto”, Universidad Tecnológica Tula-Tepeji, División de Procesos Industriales, 11 de enero al 30 de abril del 2021, Asesores: Dr. Ventura Rodríguez Lugo y M. en C. Miguel Arteaga Varela
  - 1.6. Borbón Ortiz Mónica Arely, realización del Reporte técnico con el tema, “Estudio teórico de un sistema de  $\text{Al}_2\text{O}_3$  mediante simulación molecular empleando primeros principios.”, Técnico Superior Universitario en Nanotecnología, (áreas materiales), Universidad Tecnológica de Tecámac, División de Procesos Industriales, 1 de septiembre del 2021 al 10 de diciembre del 2021, Asesores: Dr. Ventura Rodríguez Lugo y M. en C. Miguel Arteaga Varela
  - 1.7. Uriega Becerra Alan, realización del Reporte técnico con el tema, “Estudio a primeros principios de un sistema de  $\text{GeO}_2$  mediante la teoría del funcional de la densidad”, Técnico Superior Universitario en Nanotecnología, (áreas materiales), Universidad Tecnológica de Tecámac, División de Procesos Industriales, 1 de septiembre del 2021 al 10 de diciembre del 2021, Asesores: Dr. Ventura Rodríguez Lugo y M. en C. Miguel Arteaga Varela

- 1.8. Ruiz Vidal Cristian Jared, realización del Reporte técnico con el tema, “Estudio de primeros principios de la estabilidad en los sistemas ortorrómbico, triclínico y cúbico del perovskita  $\text{MoMn}_2\text{O}_4$ ”, Técnico Superior Universitario en Nanotecnología, (áreas materiales), Universidad Tecnológica de Tecámac, División de Procesos Industriales, 1 de septiembre del 2023 al 15 de diciembre del 2023, Asesores: Dr. Ventura Rodríguez Lugo y M. en C. Miguel Arteaga Varela
- 1.9. Carlos Alexis Flores Hernández, realización del Reporte técnico con el tema “Determinación de las propiedades electrónicas y ópticas de perovskita  $\text{SrZrO}_3$  bidimensional, mediante primeros principios”, carrera de ingeniería en Energía del décimo cuatrimestre de la Universidad Politécnica de Huejutla, en el periodo septiembre-diciembre 2023, Asesores: Dr. Ventura Rodríguez Lugo y M. en C. Miguel Arteaga Varela

## **E1.2. Artículos**

### **E1.2.1. Artículo JCR**

- 1.10. M. Arteaga-Varela, A. Sánchez-Castillo, A. de J. Herrera-Carbajal, V. Rodríguez-Lugo, Effect of the behavior on direct–indirect electronic transitions of  $\text{SrZrO}_3$  nanowires grown in the crystallographic directions [100] and [110]: Ab-initio study, *Materials Science in Semiconductor Processing*, Volume 180, 2024, 108540, ISSN 1369-8001, <https://doi.org/10.1016/j.mssp.2024.108540>.

### **E1.2.2. Artículos Indexados**

- 1.11. B. O. Sosa-Rosas, M. Arteaga-Varela, A. Sánchez-Castillo, M. I. Reyes-Valderrama, M. A. Camacho-González, V. Rodríguez-Lugo.” Estudio teórico de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la ferrita de gadolinio ( $\text{GdFeO}_3$ ) en fase cúbica”, *Tópicos de Investigación en Ciencias de la Tierra y Materiales*, Publicación anual, Vol. 8, No. 8 (2021) 30-36. ISSN: 2395-8405. <https://doi.org/10.29057/icbi.v9iEspecial2.7986>.
- 1.12. Sánchez-López, G., Arteaga-Varela, M., Camacho-González, M. A., Reyes-Valderrama, M. I., Sánchez-Castillo, A., & Rodríguez-Lugo, V. (2022).

Estudio a primeros principios de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del sistema  $\text{CsSnBr}_3$  empleando el código Siesta. *Pädi Boletín Científico De Ciencias Básicas E Ingenierías Del ICBI*, 10(19), 108-112. <https://doi.org/10.29057/icbi.v10i19.9146>.

- 1.13. Flores-Cruz, R., Arteaga-Varela, M., de Jesús Herrera-Carbajal, A., Sánchez-Castillo, A., Reyes-Valderrama, M. I., & Rodríguez-Lugo, V. (2023). Determinación de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de siliceno, germaneno y sistema Si-Ge mediante DFT. *Pädi Boletín Científico de Ciencias Básicas e Ingenierías del ICBI*, 11(Especial5), 61-65. DOI: <https://doi.org/10.29057/icbi.v11iEspecial5.11765>.

### **E1.3. Participaciones en Congresos nacionales e internacionales**

- 1.14. G. Sánchez López, M. Arteaga Varela, M. A. Camacho González, Ariadna Sánchez Castillo y M. I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo, “Estudio teórico de la perovskita de  $\text{CsSnBr}_3$  fase cúbica”, VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales del Capítulo Estudiantil de Materiales UAEH-SMM, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021
- 1.15. J. P. Sánchez Anaya, M. Arteaga Varela, J. A. García Melo, E. Salinas Rodríguez, A. Sánchez Castillo, V. Rodríguez Lugo,” Comportamiento estructural y electrónico de la perovskita de ferrita de bismuto: un estudio a primeros principios”, VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales del Capítulo Estudiantil de Materiales UAEH-SMM, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021.
- 1.16. M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, E. Salinas Rodríguez, M. I. Reyes Valderrama, A. Sánchez Castillo, V. Rodríguez Lugo, “Estudio teórico del tensor dieléctrico de la perovskita  $\text{SrZrO}_3$  en fase cúbica a 0, 40 y 100 GPa.”, VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales del Capítulo Estudiantil de Materiales UAEH-SMM, efectuado de manera virtual,

organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021.

- 1.17. B. O. Sosa Rosas, M. Arteaga Varela, M. A. Camacho González, A. de J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo, “Simulación molecular; estudio ab initio de propiedades electrónicas, estructurales y ópticas para la perovskita Ferrita de Gadolinio”, VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales del Capítulo Estudiantil de Materiales UAEH-SMM, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021
- 1.18. Brayann A. García, M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, E. Salinas Rodríguez, V. Rodríguez Lugo, “Estudio teórico del tensor dieléctrico de la perovskita de titanato de bario ( $\text{BaTiO}_3$ )”, VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales del Capítulo Estudiantil de Materiales UAEH-SMM, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021.
- 1.19. L- López-Ortega, M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, E. Salinas Rodríguez, M. I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales del Capítulo Estudiantil de Materiales UAEH-SMM, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021
- 1.20. Miguel Arteaga Varela, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Eleazar Salinas, Ariadna Sánchez Castillo, Ventura Rodríguez Lugo, “Theoretical study of dielectric tensor of the perovskite of  $\text{SrZrO}_3$  cubic phase at 0, 40 and 100 GPa”, XXIX International Materials Research Congress, August 15 - 20, 2021.
- 1.21. López Ortega, M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, E. Salinas Rodríguez y V. Rodríguez Lugo, “Estudio de las propiedades ópticas del  $\text{BaZrO}_3$  a primeros principios”, V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021.

- 1.22. J. P. Sánchez Anaya, M. Arteaga Varela, J. A. García Melo, E. Salinas Rodríguez, A. Sánchez Castillo y V. Rodríguez Lugo,” Comportamiento estructural y electrónico de la perovskita ferrita de bismuto: un estudio a primeros principios”, V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021.
- 1.23. B. Pedroza Rojas, M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama, E. Salinas Rodríguez y V. Rodríguez Lugo,” Estudio a primeros principios del niobato de sodio en sistemas homogéneos”, V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021.
- 1.24. B. O. Sosa Rosas, M. Arteaga Varela, M. A. Camacho González, A. de J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo,” Estudio a primeros principios de la perovskita Ferrita de Gadolinio y de sus propiedades estructurales, electrónicas y ópticas”, V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021.
- 1.25. Brayann Aldair Gutiérrez García, M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, E. Salinas Rodríguez, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo. “Determinación de la parte imaginaria de la función dieléctrica en la perovskita de  $\text{BaTiO}_3$ ”, V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021.
- 1.26. E. D. Rubio Lázaro, M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, A. Ramírez García, E. Salinas Rodríguez y V. Rodríguez Lugo.” Cálculos ab initio de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del rutenato de estroncio tipo perovskita”, V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021.
- 1.27. G. Martínez Orea, M. Arteaga Varela, M. A. Camacho Gonzalez, A. de J. Herrera Carbaja, M. I. Reyes Valderrama, A. Sánchez Castillo y V. Rodríguez Lugo,” Determinación de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la perovskita Manganato de Estroncio a primeros principios.”, V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021.

- 1.28. G. Sánchez López, M. Arteaga Varela, M. A. Camacho González, Ariadna Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo, "Optimización estructural de CsSnBr<sub>3</sub>, mediante AB inicio", V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021.
- 1.29. M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, E. Salinas Rodríguez, M. I. Reyes Valderrama, A. Sánchez Castillo y V. Rodríguez Lugo, "Estudio teórico de las propiedades electrónicas y ópticas en nanoalambres de SrZrO<sub>3</sub> crecidos en las direcciones cristalográficas [001] y [110]", V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021
- 1.30. P. S. Perrusquía Torres, M. Arteaga Varela, J. Serrano Pérez, N. Y. Martínez Palma, A. de J. Herrera Carbajal, E. Salinas Rodríguez y V. Rodríguez Lugo, "Estudio teórico de las propiedades estructurales, ópticas y electrónicas de una perovskita TiMnO<sub>3</sub> realizado a primeros principios", V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021
- 1.31. R. Flores Cruz, M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo, "Cálculo de propiedades electrónicas y estructurales del Silicio y Germanio en bulto mediante la teoría del funcional de densidad (DFT)", V Seminario regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma Hgo. del 6 al 8 de octubre de 2021.
- 1.32. M. Arteaga Varela, P.S. Perrusquía Torres, A. Sánchez Castillo, A. de J. Herrera Carbajal, M.I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo, "Estudio de las propiedades estructurales y electrónicas de la perovskita TiMnO<sub>3</sub>", Primer Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales, efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 16 y 17 de mayo de 2022.
- 1.33. M. Arteaga Varela, E.D. Rubio Lázaro, A. Sánchez Castillo, S. I. Garduño Vértiz, M.I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo. "Estudio teórico del sistema rutenato de estroncio mediante primeros principios", Primer

Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales, efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 16 y 17 de mayo de 2022.

- 1.34. M. Arteaga Varela a, G. Sánchez López, A. Sánchez Castillo, S. I. Garduño Vértiz, M.I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo., “Cálculo de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del sistema CsSnBr<sub>3</sub>”, Primer Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales, efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 16 y 17 de mayo de 2022.
- 1.35. M. Arteaga Varela, M.I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal, Ariadna Sánchez Castillo, V. Rodríguez Lugo, “Estudio de las propiedades electrónicas en un nanoalambre de SrZrO<sub>3</sub> crecido en la dirección cristalográfica [100] y [110]”, Primer Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales, efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 16 y 17 de mayo de 2022.
- 1.36. Brayan Javier Lorenzano Hernández, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, M. Arteaga Varela, María Isabel Reyes Valderrama, Otilio Arturo Acevedo Sandoval, Ventura Rodriguez Lugo, "Theoretical study of the optical and electronic properties of perovskite SrTiO<sub>3</sub> in cubic phase", XXX International Materials Research Congress, que realizó en Cancún, 14-19 de agosto del 2022.
- 1.37. M. Arteaga Varela, Gustavo Sánchez López, Ariadna Sánchez Castillo, Salvador Iván Garduño, María Isabel Reyes Valderrama, Ventura Rodriguez Lugo, "Theoretical study of the CsSnBr<sub>3</sub> perovskite and the determination of its structural, electronic, and optical properties", XXX International Materials Research Congress, que realizó en Cancún, 14-19 de agosto del 2022
- 1.38. M. Arteaga Varela, Paola Susana Perrusquía Torres, María Isabel Reyes Valderrama, Salvador Iván Garduño, Ariadna Sánchez Castillo, Ventura Rodriguez Lugo, "Study of the structural, optical, and electronic properties of

- a  $\text{TiMnO}_3$  perovskite by first principles", XXX International Materials Research Congress, que realizó en Cancún, 14-19 de agosto del 2022
- 1.39. M. Arteaga Varela, Gerardo Martínez Orea, Ariadna Sánchez Castillo, María Isabel Reyes Valderrama, Salvador Iván Garduño, Ventura Rodríguez Lugo, "Determination of the structural, electronic, and optical properties of the strontium manganate perovskite at first principles", XXX International Materials Research Congress, que realizó en Cancún, 14-19 de agosto del 2022
  - 1.40. M. Arteaga Varela, Brayan Oswaldo Sosa Rosas, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, María Isabel Reyes Valderrama, Ventura Rodríguez Lugo, "Theory study of structural, electronic and optical properties in the perovskite  $\text{GdFeO}_3$ ", XXX International Materials Research Congress, que realizó en Cancún, 14-19 de agosto del 2022
  - 1.41. M. Arteaga Varela, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ariadna Sánchez Castillo, Otilio Arturo Acevedo Sandoval, María Isabel Reyes Valderrama, Ventura Rodríguez Lugo, "Nanowire optimization of Strontium Zirconate ( $\text{SrZrO}_3$ ) type perovskite: a theoretical study of the first principles", XXX International Materials Research Congress, que realizó en Cancún, 14-19 de agosto del 2022.
  - 1.42. Rommel Flores Cruz, M. Arteaga Varela, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, María Isabel Reyes Valderrama, Ventura Rodríguez Lugo, "First-principles calculations of the structural properties and electronics of the silicon and germanium in bulk", XXX International Materials Research Congress, que realizó en Cancún, 14-19 de agosto del 2022.
  - 1.43. M. Arteaga Varela, P. S. Perrusquía Torres, A. Sánchez Castillo, A. J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo, "Estudio teórico de la perovskita  $\text{TiMnO}_3$  empleando primeros principios", VI seminario Regional de Materiales Avanzados Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Mineral de la reforma, hidalgo México del 5 al 7 de octubre del 2022
  - 1.44. M. Arteaga Varela, E. D. Rubio Lázaro, A. Sánchez Castillo, S. I. Garduño Vértiz, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo, "Cálculos a primeros

- principios del rutenato de estroncio mediante el código siesta”, VI seminario Regional de Materiales Avanzados Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Mineral de la reforma, hidalgo México del 5 al 7 de octubre del 2022
- 1.45. M. Arteaga Varela, G. Sánchez López, A. Sánchez Castillo, S. I. Garduño Vértiz, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo, “Estudio a primeros principios de las propiedades del sistema  $\text{CsSnBr}_3$ ”, VI seminario Regional de Materiales Avanzados Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Mineral de la reforma, hidalgo México del 5 al 7 de octubre del 2022
  - 1.46. M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, A. J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo,” Estudio a primeros principios en nanoalambres de  $\text{SrZrO}_3$  crecido en la dirección cristalográficas [100] y [110]”, VI seminario Regional de Materiales Avanzados Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Mineral de la reforma, hidalgo México del 5 al 7 de octubre del 2022
  - 1.47. M. Arteaga Varela, Ariadna Sánchez Castillo, María Isabel Reyes Valderrama, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal y Ventura Rodríguez Lugo, Estudio de las propiedades estructurales de sistemas unidimensionales de  $\text{SrZrO}_3$  empleando la teoría del funcional de la densidad “, Segundo Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales, efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater, Mineral de la Reforma, Hgo. 20 y 21 de abril de 2022.
  - 1.48. Florelli Acsabely Hernández Rubio, Ariadna Sánchez Castillo, M. Arteaga Varela, José de Jesús Pelayo Cárdenas, Ventura Rodríguez Lugo, (Oral) “AB-initio calculations of bimetallic CdAg and ZnCu [001] alloys nanowires”, 31st International Materials Research Congress, que realizara en Cancún, 13-18 de agosto del 2023.
  - 1.49. M. Arteaga Varela, Ariadna Sánchez Castillo, María Isabel Reyes Valderrama, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodríguez Lugo, “Study of the structural properties of unidimensional systems of  $\text{SrZrO}_3$  using the density functional theory”, 31st International Materials Research Congress, que realizara en Cancún, 13-18 de agosto del 2023.

- 1.50. M. Arteaga Varela, Ariadna Sánchez Castillo, María Isabel Reyes Valderrama, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodríguez Lugo, “Theoretical study of the properties of the CsSnBr<sub>3</sub> system; using first principles”, 31st International Materials Research Congress, que realizara en Cancún, 13-18 de agosto del 2023.
- 1.51. M. Arteaga Varela, Ariadna Sánchez Castillo, María Isabel Reyes Valderrama, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodríguez Lugo, “Theoretical study of the relationship between the structure and the electronic properties of SrZrO<sub>3</sub> nanowires using DFT”, XVI International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales, A.C., September 29th, 2023.
- 1.52. M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, A. de J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo. “Estudio teórico de las propiedades electrónicas en nanoalambres de diferentes tamaños del sistema SZO”, VII Seminario Regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma, Estado de Hidalgo, 6 de octubre del 2023.
- 1.53. M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal y V. Rodríguez Lugo, “Estudio de las propiedades estructurales en nanoalambres de metales con memoria de forma”, VII Seminario Regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma, Estado de Hidalgo, 6 de octubre del 2023.
- 1.54. M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal y V. Rodríguez Lugo, “Cálculos a primeros principios del sistema GeO<sub>2</sub> en bulto empleando DFT”, VII Seminario Regional de Materiales Avanzados, Mineral de la Reforma, Estado de Hidalgo, 6 de octubre del 2023.
- 1.55. M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal, V. Rodríguez Lugo, “Determinación del coeficiente de Poisson en nanoalambres bimetálicos”, Tercer Congreso Estatal de Investigación en Ciencias de los Materiales durante los días de 25 y 26 de abril de 2024.

- 1.56. M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal, V. Rodríguez Lugo, “Estudio teórico del comportamiento electrónico respecto a las propiedades estructurales en nanoalambres de zirconato de estroncio”, Tercer Congreso Estatal de Investigación en Ciencias de los Materiales durante los días de 25 y 26 de abril de 2024.
- 1.57. Miguel Arteaga Varela, Lesly Sabina Villaseñor Cerón, Ventura Rodríguez Lugo, “2D GOLD NANOSTRUCTURE STUDY USING FIRST-PRINCIPLES METHODS”, 32st International Materials Research Congress, que realizara en Cancún, 18-23 de agosto del 2024.
- 1.58. Rommel Flores Cruz, Miguel Arteaga Varela, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodríguez Lugo, “DESIGN AND DETERMINATION OF THE STRUCTURAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF TWO DIMENSIONAL GERMANIUM, BORON AND SILICON SYSTEMS USING THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY”, 32st International Materials Research Congress, que realizara en Cancún, 18-23 de agosto del 2024
- 1.59. Miguel Arteaga Varela, Ariadna Sánchez Castillo, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodríguez Lugo, “DETERMINATION OF THE MECHANICAL PROPERTIES OF CdAg AND CdAu BIMETALLIC NANOWIRES USING DENSITY FUNCTIONAL THEORY”, 32st International Materials Research Congress, que realizara en Cancún, 18-23 de agosto del 2024.
- 1.60. Miguel Arteaga Varela, Ariadna Sánchez Castillo, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodríguez Lugo, “THEORETICAL STUDY OF MECHANICAL PROPERTIES IN BIMETALLIC ZrRh AND ZrCu NANOWIRES WITH GROWTH DIRECTIONS [110] AND [111].”, 32st International Materials Research Congress, que realizara en Cancún, 18-23 de agosto del 2024.
- 1.61. Miguel Arteaga Varela, Ariadna Sánchez Castillo, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodríguez Lugo, “THEORETICAL STUDY OF THE ELECTRONIC BEHAVIOR IN 1D SYSTEMS OF SrZrO<sub>3</sub> INFLUENCED BY

STRUCTURAL PROPERTIES”, 32st International Materials Research Congress, que realizara en Cancún, 18-23 de agosto del 2024.

**A1.4. Reconocimientos, participación y organización de congresos**

- 1.62. Mención honorífica Maestría en Ciencias de los Materiales marzo 2021.
- 1.63. Presidente del capítulo estudiantil UAEH-SMM del 2020 al 2021.
- 1.64. Curso: Teórico - práctico en Microscopía de Fuerza Atómica Modos Pint Point Nanomecánicos, Microscopía de Fuerza-Modulación, Nanomanipulación, Nanoindentación y Nanolitografía 2021.
- 1.65. Diplomado en Formación Didáctico Pedagógico UAEH 2022.
- 1.66. Asesor de la organización en la organización del primer congreso estatal de investigación en ciencias de los materiales organizado por el capítulo estudiantil 2022.
- 1.67. Participación en organización del VI seminario regional de materiales avanzados.
- 1.68. Participación como organizador del VII Seminario Regional de Materiales Avanzados.
- 1.69. Revisor de un artículo científico para el vol. 11 número especial 5 Padi UAEH.
- 1.70. Participación como organizador del VIII Seminario Regional de Materiales Avanzados.
- 1.71. Revisor de un artículo científico para el vol. 11 número 21 Padi UAEH.
- 1.72. Participación como organizador del tercer congreso estatal de investigación en ciencias de los materiales organizado por el capítulo estudiantil 2024.
- 1.73. Participación en el Curso de Caracterización de nanomateriales por microscopía electrónica de transmisión, organizado por el capítulo estudiantil UAEH-SMMater 2024.
- 1.74. Participación en el Curso Introducción a la microscopía electrónica de barrido y microanálisis EDS, organizado por el capítulo estudiantil UAEH-SMMater 2024.

“2021. Año de la Consumación de la Independencia y la Grandeza de México”.

Tecámac, Estado de México a 2 de junio de 2021

## CONSTANCIA

Se hace constar que el

**Dr. Ventura Rodríguez Lugo**

Han participado en la asesoría del Reporte Técnico de:

Nombre del Estudiante	Matrícula	Co Asesor Institucional	Programa Educativo	Mes de Término de la Estadía Profesional
Brayan Oswaldo Sosa Rosas	2517270006	M.C.M. Miguel Arteaga Varela	Ingeniería en Nanotecnología	Abril 2021

Título del reporte:

**“Estudio de propiedades en el sistema ferrita de gadolinio; un estudio a primeros principios”**

Atentamente,



DIVISIÓN DE PROCESOS  
INDUSTRIALES

**MTRO. EN I. PAULINO JOSÉ RIVERO MELÉNDEZ**  
**DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES**

**SECRETARÍA DE EDUCACIÓN**  
SUBSECRETARÍA GENERAL DE EDUCACIÓN  
SUBSECRETARÍA DE EDUCACIÓN SUPERIOR Y NORMAL  
DIRECCIÓN GENERAL DE EDUCACIÓN SUPERIOR

“2021. Año de la Consumación de la Independencia y la Grandeza de México”.

Tecámac, Estado de México a 2 de junio de 2021

## CONSTANCIA

Se hace constar que el

**Dr. Ventura Rodríguez Lugo**

Han participado en la asesoría del Reporte Técnico de:

Nombre del Estudiante	Matrícula	Co Asesor Institucional	Programa Educativo	Mes de Término de la Estadía Profesional
Gustavo Sánchez López	2517270007	M.C.M. Miguel Arteaga Varela	Ingeniería en Nanotecnología	Abril 2021

Título del reporte:

**“Análisis de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del sistema en bulto CsSnBr<sub>3</sub>”**

Atentamente,



DIVISIÓN DE PROCESOS  
INDUSTRIALES

**MTRO. EN I. PAULINO JOSÉ RIVERO MELÉNDEZ**  
**DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES**

**SECRETARÍA DE EDUCACIÓN**  
SUBSECRETARÍA GENERAL DE EDUCACIÓN  
SUBSECRETARÍA DE EDUCACIÓN SUPERIOR Y NORMAL  
DIRECCIÓN GENERAL DE EDUCACIÓN SUPERIOR

“2021. Año de la Consumación de la Independencia y la Grandeza de México”.

Tecámac, Estado de México a 2 de junio de 2021

## CONSTANCIA

Se hace constar que el

**Dr. Ventura Rodríguez Lugo**

Han participado en la asesoría del Reporte Técnico de:

Nombre del Estudiante	Matrícula	Co Asesor Institucional	Programa Educativo	Mes de Término de la Estadía Profesional
Paola Susana Perrusquia Torres	2518170064	M.C.M. Miguel Arteaga Varela	Ingeniería en Nanotecnología	Abril 2021

Título del reporte:

**“DETERMINACIÓN DE LAS PROPIEDADES ELECTRÓNICAS Y ÓPTICAS  
EN  
EL SISTEMA  $TiMnO_3$ ”**

Atentamente

  
  
UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE TECÁMAC  
DIVISIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES

**MTRO. EN I. PAULINO JOSÉ RIVERO MELÉNDEZ  
DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES**

SECRETARÍA DE EDUCACIÓN  
SUBSECRETARÍA GENERAL DE EDUCACIÓN  
SUBSECRETARÍA DE EDUCACIÓN SUPERIOR Y NORMAL  
DIRECCIÓN GENERAL DE EDUCACIÓN SUPERIOR

“2021. Año de la Consumación de la Independencia y la Grandeza de México”.

Tecámac, Estado de México a 2 de junio de 2021

## CONSTANCIA

Se hace constar que el

**Dr. Ventura Rodríguez Lugo**

Han participado en la asesoría del Reporte Técnico de:

Nombre del Estudiante	Matrícula	Co Asesor Institucional	Programa Educativo	Mes de Término de la Estadía Profesional
Gerardo Martínez Orea	2517170068	M.C.M. Miguel Arteaga Varela	Ingeniería en Nanotecnología	Abril 2021

Título del reporte:

**“Estudio de propiedades en el sistema ferrita de gadolinio; un estudio a primeros principios”**

Atentamente,


**MTRO. EN I. PAULINO JOSÉ RIVERO MELÉNDEZ**  
**DIRECTOR DE LA DIVISIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES**

**SECRETARÍA DE EDUCACIÓN**  
SUBSECRETARÍA GENERAL DE EDUCACIÓN  
SUBSECRETARÍA DE EDUCACIÓN SUPERIOR Y NORMAL  
DIRECCIÓN GENERAL DE EDUCACIÓN SUPERIOR



Tula de Allende Hgo., a 6 de julio de 2021.

## CONSTANCIA

Por medio de la presente se hace constar que el **Dr. Ventura Rodríguez Lugo** y el **Mtro. Miguel Arteaga Varela** han fungido como **Asesor Institucional** en la dirección y asesoría del Reporte Técnico: “**Estudio a primeros principios de propiedades en la perovskita ferrita de bismuto**” del alumno Juan Pablo Sánchez Anaya, del programa educativo de Ingeniería en Nanotecnología con número de matrícula 17301101, durante el periodo de estadía Enero - Abril 2021.

Atentamente.

---

Mtra. Griselda Mendoza Hernández  
Jefa del Departamento de Prácticas y Estadías  
Universidad Tecnológica de Tula-Tepej

"2024. Año del Bicentenario de la Erección del Estado Libre y Soberano de México"

Tecámac, Estado de México a 18 de enero de 2024

## CONSTANCIA

Se hace constar que la

**Dr. Ventura Rodríguez Lugo**

Han participado en la asesoría del Reporte Técnico de:

Nombre del Estudiante	Matrícula	Programa Educativo	Co - director	Cuatrimestre de la Estadía Profesional
Ruiz Vidal Cristian Jared	2522270000	TSU en Nanotecnología, área Materiales	M. en C. Miguel Arteaga Varela	Septiembre - diciembre 2023

Título del reporte:

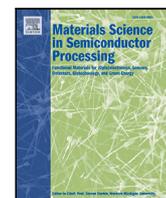
**"Estudio de primeros principios de la estabilidad en los sistemas ortorrómbico, triclinico y cúbico de la perovskita MoMn<sub>2</sub>O<sub>4</sub>".**

Atentamente



**MTRA. EN A. C. ADRIANA LUCILA GARULO FUENTES  
DIRECTORA DE LA DIVISIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES**





Full length article

## Effect of the behavior on direct–indirect electronic transitions of SrZrO<sub>3</sub> nanowires grown in the crystallographic directions [100] and [110]: Ab-initio study

M. Arteaga-Varela<sup>a</sup>, A. Sánchez-Castillo<sup>b</sup>, A. de J. Herrera-Carbajal<sup>b</sup>, V. Rodríguez-Lugo<sup>a,\*</sup><sup>a</sup> Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Instituto de Ciencias Básicas e Ingenierías, Carretera Pachuca - Tulancingo km 4.5 Ciudad del Conocimiento UAEH, Mineral de la Reforma, Hidalgo, Mexico<sup>b</sup> Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Escuela Superior de Apan, Carretera Apan-Calpulalpan Km. 8, Col Chimalpa, Apan, Hidalgo, Mexico

## ARTICLE INFO

## Keywords:

Perovskite  
SrZrO<sub>3</sub>  
Nanowire  
Stoichiometric

## ABSTRACT

In the present work, we studied a set of strontium zirconate nanowires of different diameters oriented in the directions [100] and [110]. The density functional theory calculations were performed using the quantum espresso code, which confidently employs a combination of plane waves. In this study, we utilized a pseudopotential proposed by Perdew, Burke, and Ernzerhof to model the exchange–correlation energy using a generalized gradient approximation. In the study's first phase, we performed a structural optimization of the nanowires by adjusting the atomic positions and lattice parameters. After calculating the electronic band structure and density of states, we found that the strontium zirconate nanowires in this study are semiconductors. The nanowires in the [100] direction have an indirect transition, while those in the [110] direction have a direct transition. Besides, the bandgap varies with diameter. We also calculated the density of states projected. Based on the results, it can be observed that the p orbital of oxygen is the primary contributor to the density of states in the valence region. On the other hand, in the conduction region, the density of states is mainly affected by the d and s orbitals of zirconium. Due to their exceptional electronic properties, strontium zirconate nanowires are up-and-coming candidates for photocatalysis and solar cell applications.

## 1. Introduction

Perovskites are  $ABX_3$ -type solids with an orthorhombic or cubic arrangement. They are formed by combining group I and II elements in position A, a transition metal in position B, and halogens or halides in position X, usually oxygen [1–5]. Due to the wide variety of crystallizing materials that make up its structure, perovskites have become a highly relevant advanced material in the scientific community. These materials exhibit unique properties such as giant magnetoresistance [6, 7], ferroelectricity [8,9], piezoelectricity or superconductivity [4,10], and others. The perovskite structure was first discovered in the mineral calcium titanate (CaTiO<sub>3</sub>) and is characterized by a cubic lattice. The stability of perovskites is determined by the Goldschmidt tolerance factor (Gt). The ideal perovskite structure has a Gt of 1.0, indicating maximum stability. Perovskites usually have a Gt value between 0.71 and 1.0. If the Gt value is greater than 1 in hexagonal or tetragonal structures, the A ion is too big, or the B ion is too small. In a cubic structure, the Gt value falls between 0.9 and 1.0, indicating that the A

and B ions have an ideal size. However, in orthorhombic or rhombohedral structures, the Gt value falls between 0.71 and 0.9, which means that the A ions are too small to fit into the B ion interstices [11].

SrZrO<sub>3</sub> is a type of perovskite that has the potential to be attractive due to its multiple face transitions [12]. It takes on an orthorhombic phase at room temperature to approximately 1000 K with the Pnma and Cmc21 space groups, respectively. At 1100 K, it changes to a tetragonal phase with the space group I4/mcm. At a temperature of 1440 K, Strontium Zirconate SrZrO<sub>3</sub> exhibits a cubic phase with the space group Pm3m [13–15]. Apart from this, SrZrO<sub>3</sub> perovskites have various technological applications in actuators [16], capacitors, and charge storage devices [11,14,17]. Therefore, they are of great interest for both theoretical and experimental studies.

Recent studies have shown that the properties of materials are directly related to their structure and morphology. Nanostructures, in particular, have the ability to enhance the properties of materials in bulk. Carbon is a prime example of this, as its nanostructures exhibit better properties than its bulk form. For instance, quantum dots display

\* Corresponding author.

E-mail addresses: [miguelnano1@gmail.com](mailto:miguelnano1@gmail.com) (M. Arteaga-Varela), [ariadna\\_sanchez@uaeh.edu.mx](mailto:ariadna_sanchez@uaeh.edu.mx) (A. Sánchez-Castillo), [alejandra\\_herrera@uaeh.edu.mx](mailto:alejandra_herrera@uaeh.edu.mx) (A. de J. Herrera-Carbajal), [ventura.rl65@gmail.com](mailto:ventura.rl65@gmail.com) (V. Rodríguez-Lugo).<https://doi.org/10.1016/j.mssp.2024.108540>

Received 28 November 2023; Received in revised form 6 May 2024; Accepted 16 May 2024

Available online 25 May 2024

1369-8001/© 2024 Published by Elsevier Ltd.

luminescence due to their size, carbon nanotubes exhibit polyvalent properties owing to their large surface area, which make them suitable for use as drug carriers [18,19]. Graphene, which is one of the most researched materials today, has disruptive properties such as high hardness and the ability to function as a conductive or insulating material [20,21] among others.

Nanostructures of perovskite systems, such as A, B, and C ( $\text{SrTiO}_3$ ,  $\text{BaTiO}_3$ ,  $\text{BaZrO}_3$ ,  $\text{CsSnBr}_3$ ) have properties similar to carbon nanomaterials. These properties include charge-transfer absorption, adjustable refractive index, energy absorption and transmission, and electron-hole recombination [22–24]. These properties are due to the effects produced by reducing and confining them. In 2015, Bandura et al. studied the electronic properties of  $\text{SrTiO}_3$  nanowires, revealing their potential for use in solar panels and photocatalysis. Several perovskite materials, such as bulk  $\text{SrZrO}_3$ , show promising properties for photovoltaic applications [25–28]. Combining this material with a 1D nanostructure could improve its electronic properties. There are currently no theoretical or experimental studies on the electronic properties of nanowires made from strontium zirconate ( $\text{SrZrONWs}$ ).

In this work, we conducted first-principles simulations to study stoichiometric  $\text{SrZrONWs}$  of varying diameters oriented in [100] and [110] directions. In the first part of this study, we focused on optimizing the structures of the  $\text{SrZrONWs}$ , including lattice parameters and atomic positions. The second part of the study involved computing the electronic band structure, density of states, and projected density of states. Our findings indicate that the  $\text{SrZrONWs}$  are semiconductor materials, and we have discovered that it is possible to tune their electronic properties based on their diameter and orientation.

## 2. Methodology and computational details

### 2.1. Atomic model of stoichiometric nanowires of $\text{SrZrO}_3$

The nanowires were formed from the cubic structure of  $\text{SrZrO}_3$ , known for its high thermal stability, indicating it can maintain its crystalline properties even at elevated temperatures. Additionally, it may exhibit a lower defect density compared to other crystal structures, making it suitable for applications requiring materials with high purity and long-term stability. Due to its structure, it can have a high dielectric permittivity, making it suitable for applications in electronic devices such as high-k capacitors.

Stoichiometric nanowires are formed from the cubic system of  $\text{SrZrO}_3$  by selecting two growth directions [100] and [110]; the model of the systems is given by developing a supercell with an  $n \times n$  grid pattern ( $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$ , and  $4 \times 4$ ), with each grid having  $n^2$  unit formations (UF). Thus, in the growth direction [100], the base is a cube formed by strontium atoms at the edges, while in the [110] direction, the UF takes the form of intercalated rectangles of zirconium and strontium at the bases, with single-element atoms on the sides. The resulting nanowires contain a different number of atoms but still maintain the same unit formations described earlier as  $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$ , and  $4 \times 4$ . In Figs. 1a and 1c, the cross-sectional area of the nanowires with size  $2 \times 2$  can be observed, where the material's unit cell with dashed lines for the “xy” plane can be appreciated, showing that the systems do not exhibit periodicity, having confinement in those axes; likewise, Figs. 1b and 1d show an isometric view of growth along the z-axis with three periodic cells showing the formation of a 1D nanomaterial. Strontium (Sr) atoms are represented in green, zirconium (Zr) atoms in blue, and oxygen (O) atoms in red.

### 2.2. Computational details

In this work, we conducted a theoretical study using density functional theory implemented in the Quantum Espresso code [29] to determine the structural and electronic properties of a set of nanowires listed in Table 1. We employ a Perdew–Bruke–Ernzerhof potential of

### $\text{SrZrONWs}$ direction [100]

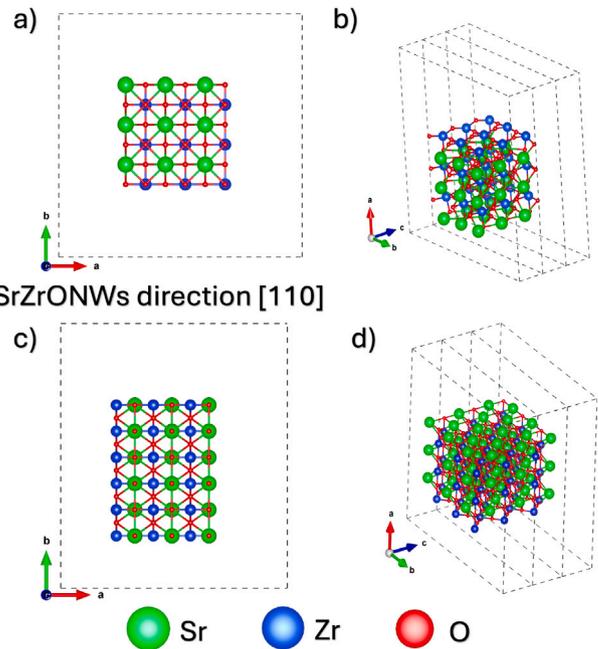


Fig. 1. Model of  $\text{SrZrO}_3$  nanowires with growth directions [100] and [110], observing the cross-sectional area (a and c), as well as an isometric view of the systems (b and d).

the generalized gradient approximation class to estimate the exchange–correlation energy. In the initial phase of our study, we fine-tuned the kinetic energy of plain waves by employing the system’s total energy as a convergence criterion. We adjusted the number of k points with the Monkhorst Pack method [30]. We set the kinetic energy of plain waves at 120 Ry and the k-point grid to  $1 \times 1 \times 7$ . Afterward, we relaxed the structure of the nanowires. The atomic coordinates and lattice parameters were adjusted simultaneously by moving the lattice parameter and atomic positions of the cell through a vc-relax type calculation until atomic forces were below 0.001 Ry/Bohr. Electronic properties were then calculated for each nanowire’s equilibrium structure. In Table 1 shows the formulas of the nanowires, associating the numerical coefficient of the subscript with the quantity of atoms present for each element. Additionally, it displays their cross-sectional area, diameter, initial and final lattice parameters, allowing for the determination of the lattice constants of the systems in equilibrium. We computed the electronic band structure and density of states (DOS) for each nanostructure using 101 k-points.

Table 1

Characteristics nanowires ( $\text{SrZrONWs}$ )  $\text{SrZrO}_3$ , crystal orientation, Cross section ( $C_s$ ) area, Diameter (D), initial lattice parameter ( $a_{0i}$ ) and final lattice parameter ( $a_{0f}$ ).

$\text{SrZrONWs}$	Orientation	$C_s$ area ( $\text{Å}^2$ )	D (Å)	$a_{0i}$ (Å)	$a_{0f}$ (Å)
$\text{Sr}_9\text{Zr}_9\text{O}_{27}$	[100]	119.749	14.628	4.150	4.035
$\text{Sr}_{16}\text{Zr}_{16}\text{O}_{48}$		220.908	20.326	4.150	4.130
$\text{Sr}_{25}\text{Zr}_{25}\text{O}_{75}$		365.039	26.011	4.150	4.161
$\text{Sr}_{18}\text{Zr}_{18}\text{O}_{46}$		118.708	18.828	5.869	5.818
$\text{Sr}_{32}\text{Zr}_{32}\text{O}_{88}$	[110]	253.549	22.272	5.869	5.869
$\text{Sr}_{50}\text{Zr}_{50}\text{O}_{140}$		500.194	32.495	5.869	6.008

After determining the equilibrium system, the electronic behavior is obtained by calculating the band structure and density of states. Fig. 2 illustrates the cross-section of nanowires grown in two different directions, [100] and [110]. The nanowires are made up of Zirconium, shown in blue, Strontium in green, and Oxygen in red. The geometric structure of the nanowires is evident from the change in cross-sectional

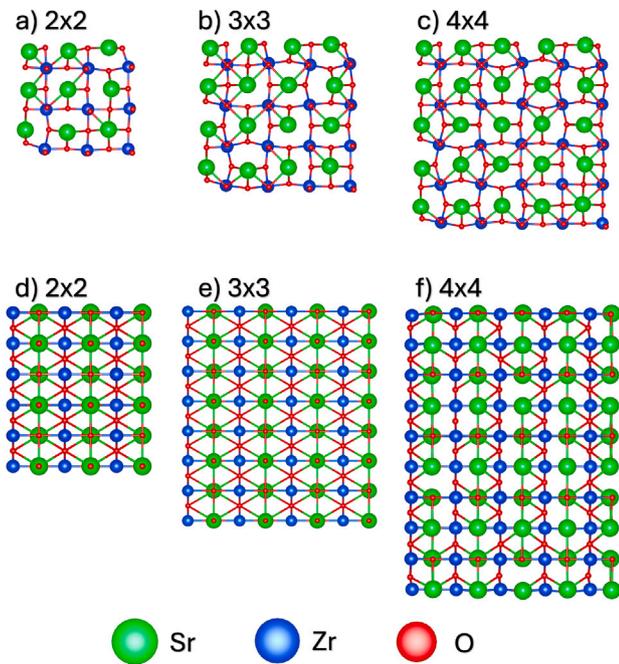


Fig. 2. Cross sections of SrZrONWs with growth directions [100] and [110] with different thicknesses:  $2 \times 2$  (a and d),  $3 \times 3$  (b and e) as well as  $4 \times 4$  (c and f), respectively.

area when the direction of crystal growth is varied. The nanowires grown in the direction [100] are square, whereas those grown in the direction [110] are rectangular along the axis perpendicular to the growth axis.

### 3. Results and discussion

#### 3.1. Stoichiometric nanowires

##### 3.1.1. Geometric optimization

The cubic system of  $\text{SrZrO}_3$  was used to model nanowires with varying formation units. After optimization, the structure of SrZrONWs in the [100] direction showed deformations. We have identified two bonds in the wires — the first is between oxygen and strontium (O-Sr), and the second is between oxygen and zirconium (O-Zr). The length of the O-Sr bond before relaxation was  $2.98 \text{ \AA}$ , while the length of the O-Zr bond was  $3.096 \text{ \AA}$  in wires oriented in both directions. After relaxation, the length of the bonds in the nanowires changed. Specifically, for nanowires oriented in the [100] direction, the O-Sr bond changed to  $2.878 \text{ \AA}$ ,  $2.891 \text{ \AA}$ , and  $2.913 \text{ \AA}$  for wires  $\text{Sr}_9\text{Zr}_9\text{O}_{27}$ ,  $\text{Sr}_{16}\text{Zr}_{16}\text{O}_{48}$  and  $\text{Sr}_{25}\text{Zr}_{25}\text{O}_{75}$ , respectively. Similarly, the O-Zr bond changed to  $2.074 \text{ \AA}$ ,  $2.091 \text{ \AA}$ , and  $2.128 \text{ \AA}$  for wires  $\text{Sr}_9\text{Zr}_9\text{O}_{27}$ ,  $\text{Sr}_{16}\text{Zr}_{16}\text{O}_{48}$  and  $\text{Sr}_{25}\text{Zr}_{25}\text{O}_{75}$ , respectively. When the [110] direction was changed, the bond length between O-Sr changed to  $3.033 \text{ \AA}$  for the nanowires  $\text{Sr}_{18}\text{Zr}_{18}\text{O}_{46}$  and  $\text{Sr}_{32}\text{Zr}_{32}\text{O}_{88}$ , being slightly smaller in the case of  $\text{Sr}_{50}\text{Zr}_{50}\text{O}_{140}$  with a value of  $2.980 \text{ \AA}$ . Similarly, the bond length between O-Zr changed to  $2.2248 \text{ \AA}$  for the nanowire  $\text{Sr}_{18}\text{Zr}_{18}\text{O}_{46}$ ,  $1.9827 \text{ \AA}$  for the nanowire  $\text{Sr}_{32}\text{Zr}_{32}\text{O}_{88}$ , and  $3.096 \text{ \AA}$  for the system  $\text{Sr}_{50}\text{Zr}_{50}\text{O}_{140}$ . On the other hand, the results showed a compression of the wires  $\text{Sr}_9\text{Zr}_9\text{O}_{27}$  and  $\text{Sr}_{16}\text{Zr}_{16}\text{O}_{48}$  (oriented in the direction [100]) since their volume shrinks from  $2672 \text{ \AA}^3$  to  $2598 \text{ \AA}^3$ , and from  $3617 \text{ \AA}^3$  to  $3600 \text{ \AA}^3$ , respectively. However, the wire  $\text{Sr}_{25}\text{Zr}_{25}\text{O}_{75}$  expands from  $4706 \text{ \AA}^3$  to  $4718 \text{ \AA}^3$ . The study showed that when the SrZrONWs were oriented in the [110] direction, the wire called  $\text{Sr}_{18}\text{Zr}_{18}\text{O}_{46}$  as its volume decreased from  $5053 \text{ \AA}^3$  to  $5010 \text{ \AA}^3$ . Additionally, the nanowires oriented in both directions tended to compress as their diameter decreased.

##### 3.1.2. Electronic properties SrZrONWs [100]

The self-consistent field calculation with 101 k points was used to compute the electronic band structure and density of states. The nanowires studied in this work were semiconductor materials, as shown in Figs. 3 and 4. Fig. 3 displays the band structure of the nanowires with [100] direction, where bandgap magnitudes of  $2.268 \text{ eV}$ ,  $2.096 \text{ eV}$ , and  $2.273 \text{ eV}$  were observed for  $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$ , and  $4 \times 4$  wires, respectively. Contrary to previous reports on one-dimensional nanostructures like nanowires or nanotubes, where the bandgap tends to decrease as the diameter of the nanowires decreases, according to the presented values. The deformation of the structure and the breaking of bonds between Zr-O and Sr-O atoms resulted in a modification of the electronic properties of these systems, presenting a higher percentage of deformation for the  $4 \times 4$  system, which may indicate an increase in its bandgap compared to the  $3 \times 3$  system. Furthermore, the indirect bandgap occurs when the transition is made from the highest energy in the valence bands (X) to the lowest energy in the region of conduction bands (Gamma). As the diameter of the wire increases, the Fermi level tends to shift closer to the region of conduction bands, indicating that nanowires oriented in the [100] direction are n-type semiconductors, and the electronic bands shift to lower energies as the diameter increases.

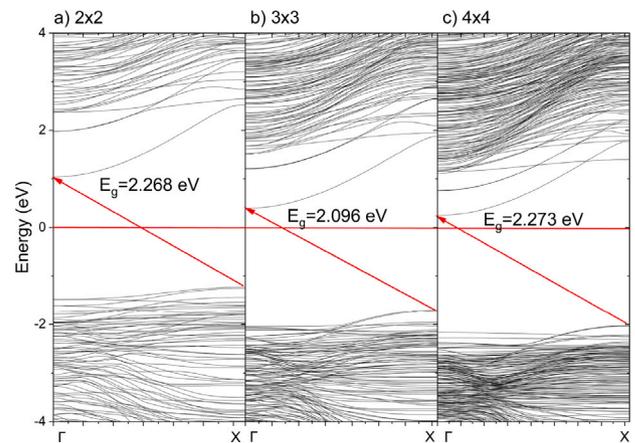


Fig. 3. Band structure for stoichiometric NW  $\text{SrZrO}_3$  with growth directions [100] with thicknesses of:  $2 \times 2$  (a),  $3 \times 3$  (b) as well as  $4 \times 4$  (c), respectively. The Fermi energy (red line) is shown at  $0 \text{ eV}$ .

##### 3.1.3. Electronic properties SrZrONWs [110]

On the contrary, SrZrONWs oriented in the [110] direction had a bandgap magnitude of  $1.624 \text{ eV}$ ,  $1.059 \text{ eV}$ , and  $1.779 \text{ eV}$  for the  $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$ , and  $4 \times 4$  nanowires, respectively. The findings indicate that the bandgap tends to decrease as the diameter of the nanowires increases. This can be observed when transitioning from  $2 \times 2$  to  $3 \times 3$ , where the energy gap decreases by  $0.565 \text{ \AA}$ , while increasing from the  $3 \times 3$  system to  $4 \times 4$ , the gap tends to increase by  $0.720 \text{ \AA}$ . It is believed that the atoms maintain a higher order while keeping their bonds intact, keeping them satisfied for smaller and intermediate-sized systems, whereas in the larger system, presenting a small number of deformations, the unsatisfied bonds could generate this increase in the gap, similarly observed with the [100]-oriented systems, where the larger nanowire, by presenting a greater number of defects and broken bonds, increased the gap compared to the intermediate system, the same effect observed in this growth direction. The transition between the valence and conduction bands occurs at the Gamma point, as shown in Fig. 4. As the diameter of the wire decreases, the Fermi level shifts towards the conduction bands. This implies that wires oriented in the [110] direction are p-type semiconductors because as the diameter increases, the electronic bands shift to higher energies. The change in the behavior of electronic transitions when changing the growth direction of the nanowires shows an anisotropic behavior because the properties are strongly affected by the sizes and growth direction of

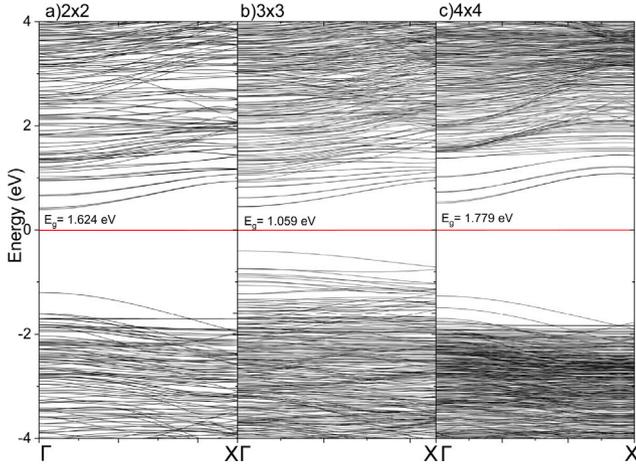


Fig. 4. Band structure for stoichiometric SrZrONWs with growth directions [110] with thicknesses of:  $2 \times 2$  (a),  $3 \times 3$  (b) and  $4 \times 4$  (c), respectively. The Fermi energy (red line) is shown at 0 eV.

SrZrONWs, requiring more energy in the [100] direction, having a more significant gap in all nanowires and the presence of an indirect transition, indicating that an even more significant amount of energy is required for the recombination of the electron-hole pair. In contrast, when presenting the [110] direction, the predominant transition was a direct gap, indicating that equal energies are required for electron-hole recombination to overcome the gap energy.

### 3.1.4. Projected density of states

To gain a deeper understanding of the electronic properties of the SrZrONWs listed in Table 1, we conducted calculations on the density of states of the s, p, and d orbitals of oxygen, strontium, and zirconium in the wires oriented along the [100] and [110] directions. According to the results, different orbitals contribute to the available states around the Fermi level in the valence and conduction regions. For wires oriented in the [100] direction with sizes of  $2 \times 2$ ,  $3 \times 3$ , and  $4 \times 4$ , the available states at the boundary between the valence bands and the bandgap are primarily due to the contribution of oxygen's p orbitals, zirconium's d and p orbitals, and strontium's p orbital. In the region between the bandgap and the conduction bands, the available states are primarily due to strontium's p and s orbitals and oxygen's p orbital. However, in nanowires oriented in the [110] direction, the contribution to available states around the Fermi level depends on the diameter of the nanowires and involves different orbitals. There are states in the conduction bands near the band gap of the  $2 \times 2$  wire due to the contribution of oxygen's p orbital, zirconium's d orbital, and strontium's p orbital. In the region of the valence bands near the bandgap, the available states are mainly contributed by zirconium's s, d, and p orbitals. However, in the  $3 \times 3$  and  $4 \times 4$  nanowires oriented in the [110] direction, the available states in the region of the conduction bands near the bandgap are mainly contributed by strontium's p orbital and zirconium's s and d orbitals. Additionally, in the region of the valence bands near the bandgap, the available states are mainly contributed by strontium's s and p orbitals and zirconium's p and s orbitals. The behavior of the density of states for both systems allows us to elucidate that the change in the growth direction of the systems modifies the material behavior, where in the [110] growth direction, the density of states shows a higher density in the valence band compared to the [100] direction, indicating that for the latter, the energy bands are more dispersed. On the other hand, the decrease in the energy gap for the [110] direction with respect to the [100] direction corroborates the behavior presented in the band structures for both systems. This behavior associated with the type of transition

can also be confirmed by presenting the maximum density of states of the conduction band at lower energies for the nanowires oriented in the [110] direction, thus demonstrating the pronounced anisotropy of the nanostructures of the SrZrO<sub>3</sub> system (see Fig. 5).

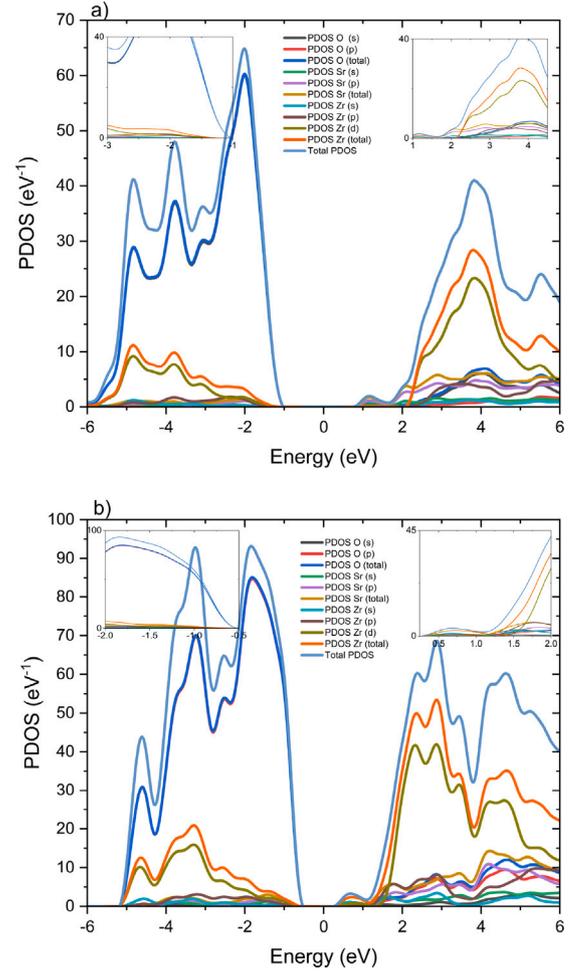


Fig. 5. Projected density of states SrZrONWs  $2 \times 2$  [100] (a) and  $2 \times 2$  [110] (b).

To evaluate the stability of SrZrONWs, the cohesion energy has been calculated using the following equation:

$$E_{cohesion} = \frac{E_{sys} - E_{Sr}N_{Sr} - E_{Zr}N_{Zr} - E_{O}N_{O}}{N_{sys}} \quad (1)$$

where  $E_{sys}$  is the total energy of the wire,  $E_{Sr}$ ,  $E_{Zr}$ , and  $E_{O}$  are the energies of an isolated atom of strontium, zirconium, and oxygen, respectively,  $N_{Sr}$ ,  $N_{Zr}$ , and  $N_{O}$  represent the number of atoms of strontium, zirconium, and oxygen, respectively, and  $N_{sys}$  is the number of atoms in the system. In Fig. 6, we can observe the cohesion energy for the SrZrONWs oriented in the [100] direction (Fig. 6a) and [110] direction (Fig. 6b), where it can be seen that increasing the size of the systems results in higher cohesion energies, indicating greater stability of the nanowires. The cohesive energies start at low values for both systems with a size of  $2 \times 2$ , reaching the highest energy for the  $4 \times 4$  systems.

The behavior of the bandgap of SrZrO<sub>3</sub> nanowires exhibits semiconductor behavior with two distinct transitions depending on the growth direction of the study systems. For the [100] orientation, the band transition is of the indirect type with gap values in the visible spectrum range, making the nanowires promising candidates as photocatalysts. The adjustment made in the energy gap of the nanostructured systems allows transitioning from the initially presented value of 5.6 eV to

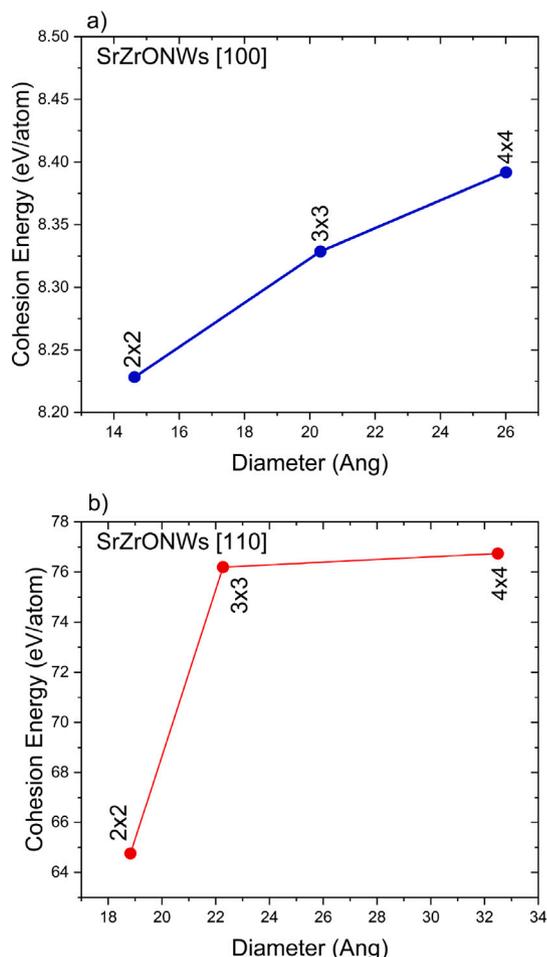


Fig. 6. Behavior of the cohesion energy of SrZrONWs with orientation (a) [100] and (b) [110] with increasing units of formation.

values suitable for utilization in photocatalysis processes, enabling the adjustment of the working range to that provided by sunlight. Similarly, in the [110] growth direction, presenting smaller gap values and a direct transition between bands expands the working range of this SrZrO<sub>3</sub> material, albeit with different morphology and orientations, making it an extremely versatile candidate within the wavelength range of 540 to 1171 nm. Another application with great potential for SrZrONWs with determined electronic properties go hand in hand with adjusting their energy gap with orientation and size, as this allows for the optimization of light absorption and energy conversion efficiency of solar cells based on these perovskite systems. With this study, it opens the door to designing nanomaterials with specific properties, in this case, allowing for efficient light absorption in the solar spectrum, maximizing the conversion of solar energy into electricity because it can exhibit high carrier mobility, meaning that electrons and holes can move easily through the material.

#### 4. Conclusion

We performed a first-principles simulation on stoichiometric strontium zirconate nanowires with [100] and [110] growth directions. Our study revealed that our system differs from the study conducted by Bandura et al. on SrTiO<sub>3</sub>. The behavior of our system is more consistent with band theory, where a forbidden energy gap occurs and the Fermi level lies between the valence and conduction bands. This suggests that the pseudopotential used in our study is more accurate in predicting the system's properties than the one reported by Bandura. In contrast,

Bandura's system does not accurately reproduce the correct electronic properties. The electronic properties of the nanowires are influenced by how their structures are formed in the [100] growth direction. As a result, the bandgap energy of larger nanowires is greater than that of intermediate-sized ones. This supports the band theory, indicating that the bandgap decreases as the number of atoms in the system increases. However, this is not the case for the 4 × 4 system. Projected density of states is a valuable tool for identifying the orbitals that contribute to the formation of energy bands in a material. In the case of this material, we can see that the 2p orbitals of oxygen and the 4d and 5s orbitals of Zr are the main contributors to each energy band. The energy gap of the presented systems falls within the range of the electromagnetic spectrum provided by the solar star, allowing the materials presented in the research to be used as photocatalysts or in the implementation of solar cells, as they possess energy band gaps lower than the most common photocatalyst, TiO<sub>2</sub>, making these systems excellent candidates for such applications.

#### CRedit authorship contribution statement

**M. Arteaga-Varela:** Writing – original draft, Methodology, Investigation, Conceptualization. **A. Sánchez-Castillo:** Supervision, Software, Resources, Methodology, Investigation. **A. de J. Herrera-Carbajal:** Writing – review & editing, Validation, Investigation, Conceptualization. **V. Rodríguez-Lugo:** Writing – review & editing, Validation, Methodology, Investigation, Conceptualization.

#### Declaration of competing interest

The authors declare the following financial interests/personal relationships which may be considered as potential competing interests: Ventura Rodriguez Lugo reports administrative support was provided by Autonomous University of Hidalgo State. Ventura Rodriguez Lugo reports a relationship with Autonomous University of Hidalgo State that includes: non-financial support. Ventura Rodriguez Lugo has patent pending to no. If there are other authors, they declare that they have no known competing financial interests or personal relationships that could have appeared to influence the work reported in this paper.

#### Data availability

Data will be made available on request.

#### Acknowledgments

CONACYT is thanked for the support provided through the scholarship awarded to Miguel Arteaga Varela in the Traditional Doctorate Program 4192, to the National Supercomputing Laboratory of Southeast Mexico for the support received in computing resources to carry out this study (project 202201046N), and to Blanca Lisbeth Pérez for the English language review.

#### References

- [1] J.P. Attfield, P. Lightfoot, R.E. Morris, *Perovskites*, Dalton Trans. 44 (2015) 10541–10542.
- [2] A. Bhalla, R. Guo, R. Roy, The perovskite structure—a review of its role in ceramic science and technology, *Mater. Res. Innov.* 4 (2000) 3–26.
- [3] P. Schouwink, M.B. Ley, A. Tissot, H. Hagemann, T.R. Jensen, L. Smrcok, R. Cerný, Structure and properties of complex hydride perovskite materials, *Nature Commun.* 5 (2014) 5706.
- [4] F. Brivio, A.B. Walker, A. Walsh, Structural and electronic properties of hybrid perovskites for high-efficiency thin-film photovoltaics from first-principles, *APL Mater.* 1 (2013) 042111.
- [5] J. Qian, B. Xu, W. Tian, A comprehensive theoretical study of halide perovskites ABX<sub>3</sub>, *Org. Electron.* 37 (2016) 61–73.
- [6] Y. Tokura, Y. Tomioka, H. Kuwahara, A. Asamitsu, Y. Moritomo, M. Kasai, Origins of colossal magnetoresistance in perovskite-type manganese oxides (invited), *J. Appl. Phys.* 8 (1996) 5288–5291.

- [7] O. Shlyakhtin, Y.J. Oh, Y. Tretyakov, Enhanced low field magnetoresistance at room temperature in  $\text{La}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3/\text{SrTiO}_3(\text{SrZrO}_3)$  composites, *Solid State Commun.* 117 (4) (2001) 261–266, [http://dx.doi.org/10.1016/S0038-1098\(00\)00452-X](http://dx.doi.org/10.1016/S0038-1098(00)00452-X), URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S003810980000452X>.
- [8] V.S. Zhandun, V.I. Zinenko, Lattice dynamics and the ferroelectric and antiferrodistorsive instabilities in a bulk crystal and thin films of  $\text{SrZrO}_3$ , *Phys. Solid State* 54 (2012) 388–1396.
- [9] S.K. Gupta, N. Pathak, P. Ghosh, B. Rajeshwari, V. Natarajan, R. Kadam, Temperature dependent electron paramagnetic resonance (EPR) of  $\text{SrZrO}_3$ , *J. Magn. Magn. Mater.* 391 (2015) 101–107.
- [10] D.S. Paik, S.E. Park, T.R. Shrout, W. Hackenberger, Dielectric and piezoelectric properties of perovskite materials at cryogenic temperatures, *J. Mater. Sci.* 3 (1999) 469–473.
- [11] L. Cai, A.L. Arias, J.C. Nino, The tolerance factors of the pyrochlore crystal structure, *J. Mater. Chem.* 21 (2011) 3611–3618.
- [12] R. Vali, Lattice dynamics of cubic  $\text{SrZrO}_3$ , *J. Phys. Chem. Solids* 69 (2008) 876–879.
- [13] Y. Zhao, D.J. Weidner, Thermal expansion of  $\text{SrZrO}_3$  and  $\text{BaZrO}_3$  perovskites, *Phys. Chem. Miner.* 18 (1991) 294–301.
- [14] R. Eglitis, S. Piskunov, First principles calculations of  $\text{SrZrO}_3$  bulk and  $\text{ZrO}_2$ -terminated (001) surface F centers, *Comput. Condens. Matter* 7 (2016) 1–6.
- [15] K.S. Knight, C.L. Bull, Low temperature and high pressure thermoelastic and crystallographic properties of  $\text{SrZrO}_3$  perovskite in the pbnm phase, *Solid State Sciences* 62 (2016) 90–104.
- [16] G. Nazir, A. Ahmad, M.F. Khan, S. Tariq, Putting DFT to the trial: First principles pressure dependent analysis on optical properties of cubic perovskite  $\text{SrZrO}_3$ , *Comput. Condens. Matter* 4 (2015) 32–39.
- [17] Z. Li, H. Duan, Y. Jin, S. Zhang, Y. Lv, Q. Xu, Y. Hu, Intrinsic defects and spectral characteristics of  $\text{SrZrO}_3$  perovskite, *Physica B* 534 (2018) 105–112.
- [18] V.N. Popov, Carbon nanotubes properties and application, *Mater. Sci. Eng. R* 43 (2004) 61–102.
- [19] M. Dresselhaus, G. Dresselhaus, R. Saito, *Physics of carbon nanotubes*, *Carbon* 33 (1995) 883–891.
- [20] A. Lancichinetti, S. Fortunato, Benchmarks for testing community detection algorithms on directed and weighted graphs with overlapping communities, *Phys. Rev. E* 80 (2009) 016118.
- [21] C. Soldano, A. Mahmood, E. Dujardin, Production, properties and potential of graphene, *Carbon* 48 (2010) 2127–2150.
- [22] B. Tang, Y. Hu, J. Lu, H. Dong, N. Mou, X. Gao, H. Wang, X. Jiang, L. Zhang, Energy transfer and wavelength tunable lasing of single perovskite alloy nanowire, *Nano Energy* 71 (2020) 104641, <http://dx.doi.org/10.1016/j.nanoen.2020.104641>, URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S2211285520301981>.
- [23] D.I. Markina, A. Pushkarev, S. Makarov, Theoretical study of perovskite nanowires optical response to hydrogen halides vapor exposure, *J. Phys. Conf. Ser.* 2015 (1) (2021) 012087, <http://dx.doi.org/10.1088/1742-6596/2015/1/012087>.
- [24] Q. Fu, J.L. Li, T. He, G.W. Yang, Band-engineered  $\text{CaTiO}_3$  nanowires for visible light photocatalysis, *J. Appl. Phys.* 113 (10) (2013) 104303, <http://dx.doi.org/10.1063/1.4794196>.
- [25] P. Gao, M. Gratzel, M.K. Nazeeruddin, Organohalide lead perovskites for photovoltaic applications, *Energy Environ. Sci.* 7 (2014) 2448–2463.
- [26] S. Gillani, R. Ahmad, M. Rizwan, M. Rafique, G. Ullah, C. Cao, H. Jin, Effect of magnesium doping on band gap and optical properties of  $\text{SrZrO}_3$  perovskite: A first-principles study, *Optik* 119 (2019) 132–138.
- [27] N.-G. Park, Perovskite solar cells: an emerging photovoltaic technology, *Mater. Today* 18 (2015) 65–72.
- [28] L.N. Quan, B.P. Rand, R.H. Friend, S.G. Mhaisalkar, T.W. Lee, E.H. Sargent, Perovskites for next-generation optical sources, *Chem. Rev.* 119 (2019) 7444–7477.
- [29] P. Giannozzi, S. Baroni, N. Bonini, M. Calandra, R. Car, C. Cavazzoni, D. Ceresoli, G. Chiarotti, M. Cococcioni, I. Dabo, A. Corso, S. de Gironcoli, S. Fabris, G. Fratesi, R. Gebauer, U. Gerstmann, C. Gougoussis, A. Kokalj, M. Lazzeri, R. Wentzcovitch, QUANTUM ESPRESSO: a modular and open-source software project for quantum simulations of materials, *J. Phys. Condens. Matter* 21 (2009) 395502.
- [30] H.J. Monkhorst, J.D. Pack, Special points for Brillouin-zone integrations, *Phys. Rev. B* 13 (1976) 5188–5192, <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.13.5188>.

## Estudio teórico de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la ferrita de gadolinio ( $GdFeO_3$ ) en fase cúbica

### Theoretical study of the structural, electronic and optical properties of gadolinium ferrite ( $GdFeO_3$ ) in cubic phase

B. O. Sosa-Rosas <sup>a</sup>, M. Arteaga-Varela <sup>b</sup>, A. Sánchez-Castillo <sup>c</sup>, M. I. Reyes-Valderrama <sup>b</sup>  
M. A. Camacho-González <sup>a</sup>, V. Rodríguez-Lugo <sup>b,\*</sup>

<sup>a</sup> Universidad Tecnológica de Tecámac, 55740, Tecámac, Estado de México, México.

<sup>b</sup> Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Pachuca, Hidalgo, México.

<sup>c</sup> Departamento de Nanotecnología, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 43920 Hidalgo, México.

#### Resumen

En el presente trabajo se realizó la predicción de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la perovskita de ferrita de gadolinio ( $GdFeO_3$ ), obtenidos mediante cálculos ab-initio basados en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT, por sus siglas en inglés), implementado en el Código SIESTA. El estudio se realizó empleando la Aproximación de Gradiente Generalizado (GGA, por sus siglas en inglés), y la Aproximación Local de la Densidad (LDA, por sus siglas en inglés), con los funcionales de intercambio-correlación de PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) para la GGA, y el funcional CA (Ceperley y Alder) para la LDA con el fin de comparar estos resultados con los parámetros experimentales disponibles para inferir con cuál de las dos aproximaciones (LDA o GGA) se obtienen resultados más confiables. El parámetro de red calculado con estas aproximaciones fue de  $a_0 = 3.841 \text{ \AA}$  y  $a_0 = 3.701 \text{ \AA}$  para GGA y LDA, respectivamente. Por otro lado, se realizó el cálculo de estructura de bandas y densidad de estados *encontrando que el material tiene un comportamiento metálico*. Finalmente, la parte imaginaria de la función dieléctrica muestra un pico de absorción significativo a una energía de aproximadamente 0.377 eV para GGA y 0.272 eV para LDA en el rango infrarrojo perteneciente a los modos vibracionales del sistema.

#### Palabras Clave:

Perovskita,  $GdFeO_3$ , DFT, pseudopotencial, estructura de bandas, densidad de estados, tensor dieléctrico.

#### Abstract

In the present work, the prediction of the structural, electronic, and optical properties of gadolinium perovskite ferrite ( $GdFeO_3$ ) was performed, obtained through ab-initio calculations based on the Density Functional Theory (DFT), implemented in the SIESTA Code. The study was carried out using the Generalized Gradient Approximation (GGA), and the Local Approximation of Density (LDA), with the exchange-correlation functionalities of PBE (Perdew-Burke-Ernzerhof) for the GGA, and the functional CA (Ceperley and Alder) for the LDA to compare these results with the available experimental parameters to infer with which of the two approximations (LDA or GGA) they are obtained more reliable results. The lattice parameter calculated with these approximations was  $a_0 = 3.841 \text{ \AA}$  and  $a_0 = 3.701 \text{ \AA}$  for GGA and LDA, respectively. On the other hand, the calculation of Band Structure and State Density was carried out, finding that the material has a metallic behavior. Finally, the imaginary part of the dielectric function shows a significant absorption peak at an energy of approximately 0.377 eV for GGA and 0.272 eV for LDA in the infrared range belonging to the vibrational modes of the system.

#### Keywords:

Perovskite,  $GdFeO_3$ , DFT, pseudopotential, band structure, density of states, dielectric tensor.

#### 1. Introducción

Los óxidos metálicos en fase de perovskita con fórmula  $MFeO_3$  (donde M es un metal), exhiben una variedad de propiedades físicas interesantes que incluyen comportamiento

ferroeléctrico, dieléctrico, piroeléctrico y piezoeléctrico, magnético, fluorescencia, etc. Algunos de ellos son óxidos conductores transparentes que pueden utilizarse para aplicaciones optoelectrónicas. En general, son materiales funcionales que tienen aplicaciones como catalizadores, sensores, semiconductores, materiales magnéticos y magneto-ópticos. Sus propiedades eléctricas, ópticas y magnéticas, que suelen ser

\*Autor para la correspondencia: ventura.rl65@gmail.com

Correo electrónico: braos98sosa@gmail.com (Brayan Oswaldo Sosa-Rojas), miguelnano1@gmail.com (Miguel Arteaga-Varela), ariadna\_sanchez@uaeh.edu.mx (Ariadna Sánchez-Castillo), isareyv@hotmail.com (María Isabel Reyes-Valderrama), ibqmony@gmail.com (Mónica Araceli Camacho-González), ventura.rl65@gmail.com (Ventura Rodríguez-Lugo).

inusuales, dependen del arreglo de átomos en su estructura cristalina (Blanco et al., 2015).

Entre este tipo de materiales se encuentra el  $\text{GdFeO}_3$ , el cual puede encontrarse con diferentes arreglos estructurales pertenecientes a los grupos espaciales,  $\text{Pnma}$ ,  $\text{Pc21n}$ ,  $\text{Pbnm}$ ,  $\text{Pm-3m}$  y  $\text{R3c}$  con iones  $\text{Fe}^{3+}$  en el centro y  $\text{Gd}^{3+}$  en las esquinas rodeados por octaedros de oxígeno. La estructura que más se ha estudiado es la ortorrómbica, en esta fase se ha comprobado que el  $\text{GdFeO}_3$  posee ferroelectricidad sintonizable magnéticamente debido al mecanismo de restricción de cambio. Tokura et. al, establecieron que la interacción entre los giros de Fe y Gd y la restricción de intercambio asociada puede dar lugar a una apreciable distorsión de la red polar que da como resultado una polarización relativamente grande alrededor de la temperatura de transición anti-ferromagnética.

De tal manera que la  $\text{GdFeO}_3$  en fase ortorrómbica se ha sintetizado mediante varias técnicas como síntesis hidrotermal (Zhang et al., 2012), sol-gel (Karoblis et al., 2021), coprecipitación (Albadi et al., 2020), microondas (Tang et al., 2014), combustión (Chavan & Tyagi, 2005), poliol, etc. (Cortés-Escobedo et al., 2014) y también se han estudiado sus propiedades, ferroeléctricas, magnéticas, fotoluminiscentes, entre otras (Prakash et al., 2014). Otra característica importante del  $\text{GdFeO}_3$  en esta fase, es que a bajas temperaturas cuenta con propiedades paramagnéticas y a medida que aumenta la temperatura, presenta una transición de paramagnetismo al antiferromagnetismo. Por otro lado, (Wu et al., 2014) demostraron que la polarización ferroeléctrica y magnetización son controlados con éxito por campos magnéticos y eléctricos.

En contraste, hay pocos estudios acerca de la estructura cúbica de este material, y dado que muchas propiedades son derivadas de su configuración atómica, consideramos de interés científico y tecnológico estudiar las propiedades estructurales, ópticas y electrónicas de esta fase para determinar sus posibles aplicaciones. Por lo tanto, en el presente trabajo de investigación se realizó un estudio ab-initio comparativo empleando la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA), utilizando el funcional de intercambio y correlación de Perdew-Burke-Ernzerhof (PBE), y la Aproximación de la Densidad Local (LDA) y el funcional de intercambio y correlación de Ceperley y Alder (CA, por sus siglas en inglés), mediante el principio de la mínima energía, para obtener la estructura cúbica optimizada con un arreglo espacial de Pm-3m del  $\text{GdFeO}_3$ , su estructura de bandas, densidad de estados y finalmente la parte imaginaria del tensor dieléctrico .

## 2. Metodología

El código SIESTA se basa en la Teoría del Funcional de la Densidad, usando funciones de orbitales atómicos localizados (LCAO) para describir la función de onda, la Aproximación del Gradiente Generalizado (GGA) y la Aproximación Local de la Densidad (LDA) (Ordejón, 2000).

Las ecuaciones de la Teoría del Funcional de la Densidad se resuelven utilizando el método de campo autoconsistente (SCF); para un hamiltoniano, la ecuación de Schrödinger de una partícula e resuelve minimizando la matriz de energía y densidad electrónica para obtener el estado fundamental. Esto se realiza mediante diagonalización de la matriz o mediante un algoritmo de

escala lineal. Estos han sido revisados extensamente en varias publicaciones. SIESTA implementa dos algoritmos  $O(N)$  basados en funciones de onda localizadas, (Ordejón, 2000).

La ecuación de Schrödinger ayuda a predecir la distribución de los resultados o eventos. Todas las propiedades de la estructura electrónica de la materia se rigen por la ecuación de Schrödinger dependiente del tiempo. Para interacciones independientes del tiempo como se muestra en la ecuación 1.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \hat{\Psi}(r) = \hat{H} E_{tot} \hat{\Psi}(r) \quad (1)$$

Donde  $E_{tot}$  y  $\hat{\Psi} = \hat{\Psi}(r_1, r_2, \dots, r_N; R_1, R_2, \dots, R_M)$  son la energía total del sistema y la función de onda de muchos cuerpos que contiene información sobre los  $N$ -electrones y los núcleos  $M$  del sistema.  $\hat{H}$  es el operador hamiltoniano y que representa la contribución de energía cinética y potencial del sistema dada por la ecuación 2.

$$\hat{H} = \hat{T}_e + T_n - \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn} + \hat{V}_{ee}, \quad (2)$$

La simulación del sistema se inició considerando como estructura base la estructura ortorrómbica de ferrita de gadolinio (Geller, 1956) y que se encuentra en un grupo espacial  $\text{Pnma}$ . Por otro lado, se tomará el grupo espacial de  $\text{Pm-3m}$ , con una cantidad total de 5 átomos, un átomo de gadolinio, un de hierro y tres de oxígeno. La imposición de las condiciones de contorno periódicas al modelo tiene sentido en el presente caso considerando la aproximada naturaleza.

De tal manera, se realizó una optimización de la estructura usando gradientes analíticos de la energía con respecto los parámetros de red y las coordenadas atómicas de la estructura  $\text{GdFeO}_3$  cúbica, para obtener las posiciones de los átomos y hacer converger los cálculos por el método de campo autoconsistente. En la Tabla 1 se muestran los parámetros estructurales como parámetro de red, ángulos y posiciones de Wyckoff para la fase cúbica del  $\text{GdFeO}_3$ .

**Tabla 1.** Coordenadas atómicas de  $\text{GdFeO}_3$  con una estructura cúbica.

Grupo espacial	# 221	Pm-3m
Parámetro de red (Å)	$a = 3.8654$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$
Elemento	Wyckoff	
Gd	1b	
Fe	1a	
O	3c	

Para predecir las propiedades estructurales del sistema, se realizaron los ajustes del tamaño de la función de onda y de puntos  $k$  de la red recíproca. Con dichos ajustes se realizó la optimización estructural en condiciones de mínima energía se calculó la estructura de bandas, la densidad de estados y la parte imaginaria del tensor dieléctrico.

a. Ajuste de la función de onda de prueba y ajuste de puntos de alta simetría

En primer lugar, se ajustó el tamaño de la función de onda (meshcutoff) mediante el movimiento rígido de la estructura en el espacio. Se probaron energías de corte de 100 hasta 550 Ry para expandir las funciones de onda 550 Ry (valores de la constante de Rydberg) para el caso de GGA (Figura 1a), y de 200 Ry a 500 Ry para LDA (Figura 1b) delimitando así las ondas planas a un número finito; las cuales se utilizan para encontrar el valor de las fuerzas interatómicas menor a 0.1 eV.

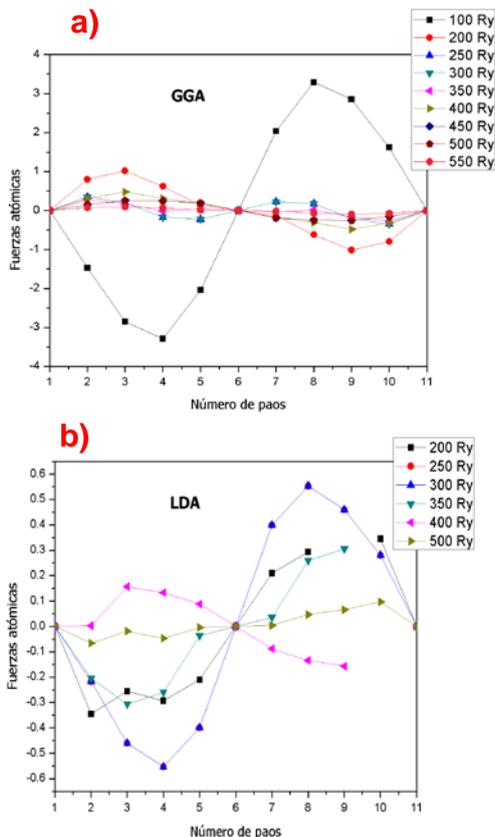


Figura 1. Gráficas de convergencia del tamaño de la función de onda de prueba de las fuerzas interatómicas con respecto al Meshcutoff en valores de Ry para GGA (a) y LDA (b).

Por otra parte, se empleó el ajuste del mallado de puntos k, usando el método de Monkhorst-Pack, en la cual se determina el número mínimo de puntos k necesarios para describir la red recíproca del sistema. Las mallas utilizadas para determinar el mallado óptimo fueron: 5x5x5, 7x7x7, 9x9x9, 11x11x11 y 13x13x13 para GGA y LDA, dando como resultado que el mejor ajuste de la malla de Monkhorst-Pack es 5x5x5 para GGA y 7x7x7 para LDA.

b. Optimización estructural

Con los ajustes óptimos del tamaño de función de onda y el número de puntos k, se determina la constante de red de la estructura de la ferrita de gadolinio. Con la finalidad de obtener la estructura más estable, se calcula la energía total del sistema para diferentes constantes de red, en este caso se utilizaron valores de 3.501 a 4.291 Å. En la Figura 2 se presentan los valores de la energía obtenidos en función del parámetro de red para GGA y en la Figura 3 para la aproximación de LDA. Se puede observar que la energía mínima corresponde al parámetro de red de 3.841 Å y de 3.701 Å para GGA y LDA, respectivamente.

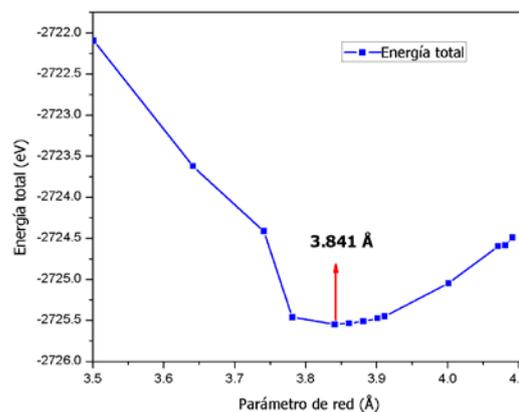


Figura 2. Optimización estructural de GdFeO3 para GGA con variación de parámetro de red con 0.01 Å

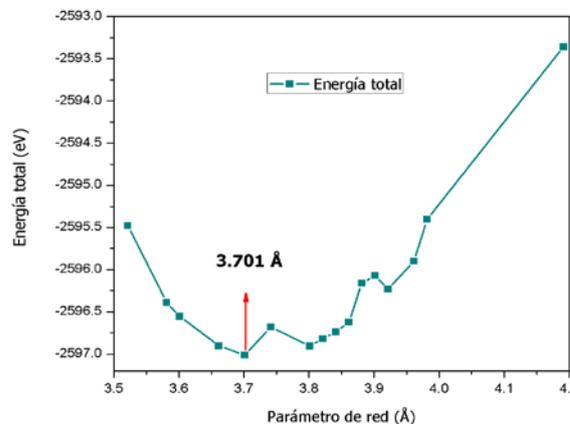


Figura 3. Optimización estructural de GdFeO3 para LDA con variación de parámetro de red con 0.01 Å.

c. Estructura de bandas y Densidad de Estados

Usando la estructura de mínima energía, se llevaron a cabo los cálculos para determinar la estructura de bandas y densidad de estados electrónica (DOS, por sus siglas en inglés) usando los puntos de alta simetría  $\Gamma$ , X, M,  $\Gamma$ , R y X de la zona de Brillouin correspondiente al espacio recíproco (Ver Tabla 2).

Tabla 2. Coordenadas de puntos de alta simetría (puntos K) en un espacio recíproco.

Zona de Brillouin	Vectores en el espacio recíproco		
$\Gamma$	0.000	0.000	0.000
X	0.500	0.000	0.000
M	0.500	0.500	0.000
$\Gamma$	0.000	0.000	0.000
R	0.500	0.500	0.500
X	0.500	0.000	0.000

La Densidad de estados (DOS) se calculó en el intervalo de energías de -25.44 a 231.09 eV con un espaciado de 0.2 eV como se muestra en la Figura 4.

```
%block ProjectedDensityOfStates
-25.4456005 231.092194 0.200 500 eV
%endblock ProjectedDensityOfStates
```

**Figura 4.** Script original con bloque para Densidad de Estados (DOS).

#### d. Tensor dieléctrico

El último estudio realizado permite observar el espectro de absorción de la ferrita de gadolinio, el cual está directamente relacionado con la parte imaginaria del tensor dieléctrico que se calculó en un rango de energía de 0 a 3 Ry con un ensanchamiento de 0.02 Ry y una malla de 5x5x5 como puede observarse en la Figura 5.

```
OpticalCalculation true
Optical.Energy.Minimum 0 Ry
Optical.Energy.Maximum 3 Ry
Optical.Broaden 0.02 Ry
Optical.Scissor 0 Ry

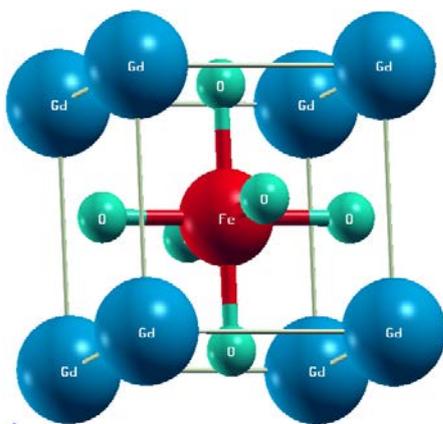
%block Optical.Mesh
5 5 5
%endblock Optical.Mesh
```

**Figura 5.** Script original con bloque para la parte imaginaria del tensor dieléctrico.

### 3. Resultados

#### a. Propiedades estructurales

Por medio de la optimización estructural del  $\text{GdFeO}_3$  utilizando las aproximaciones GGA y LDA se obtuvo una estructura estable con un grupo espacial Pm-3m mostrada en la Figura 6. La estructura cristalina está formada por un total de 5 átomos distribuidos de la siguiente forma: un átomo de  $\text{Fe}^{+3}$  en el centro, un átomo de  $\text{Gd}^{+3}$  en los vértices y 3 átomos de  $\text{O}^{-2}$  en el centro de las caras, formando una estructura cúbica centrada en las caras (FCC, por sus siglas en inglés).



**Figura 6.** Representación 3D de la estructura cristalina de la perovskita  $\text{GdFeO}_3$  con grupo espacial Pm-3m generada por Xcrysden.

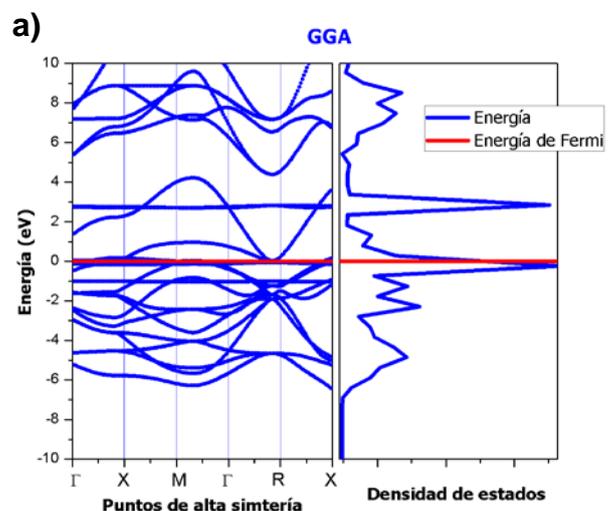
El parámetro de red de la estructura de mínima energía calculada con GGA es de 3.841 Å, mientras que el calculado con LDA de 3.701 Å. De acuerdo con lo reportado en la literatura de manera experimental, el parámetro de red de esta estructura es de 3.865 Å (Blasco et al., 2006); por lo que se puede concluir que la aproximación de GGA es más adecuada para predecir las propiedades estructurales de este sistema, puesto que se obtiene un valor más aproximado al experimental con un error del 0.042 Å. En cuanto a reportes teóricos, solo se han desarrollado para estructuras ortorrómbicas con grupos espaciales Pbnm (Paul et al., 2021) y Pnma (Jain et al., 2013). En estas estructuras las posiciones de  $\text{Gd}_1$ ,  $\text{Fe}_1$  y  $\text{Fe}_2$  se encuentran rodeadas por un octaedro de oxígeno lo que ocasiona una distorsión en la red, (Li & Li, 2020) que son las responsables de las propiedades que presentan estos sistemas.

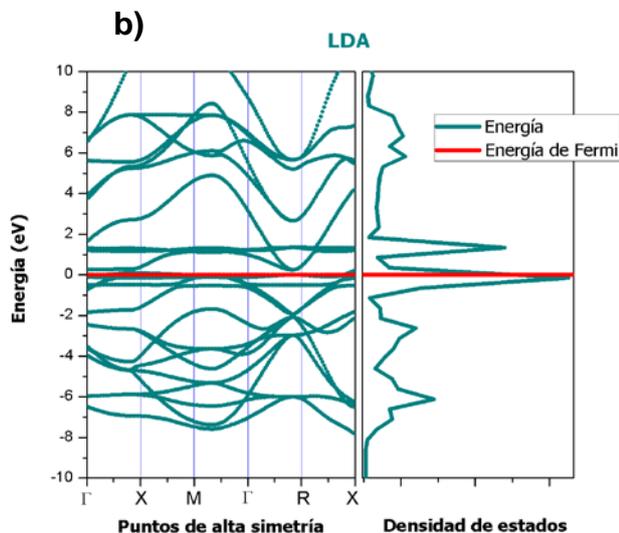
#### b. Propiedades electrónicas

La estructura de bandas, describe la estructura electrónica de un material como una estructura de bandas electrónicas (Pliego et al., 2006). Por otra parte, la densidad de estados (DOS) describe el número de estados electrónicos disponibles para que los electrones ocupen en los orbitales atómicos proyectados en un espacio recíproco.

La estructura de bandas electrónica para la  $\text{GdFeO}_3$  se calculó siguiendo como ruta los puntos K de alta simetría de la primera zona Brillouin descritos en la sección 2.3 usando las aproximaciones de GGA y LDA, las cuales se representan en la Figura 7a) y Figura 7b), respectivamente. En el gráfico correspondiente a la estructura de bandas (lado izquierdo en ambas gráficas) es posible observar las regiones de energía definidos como Bandas de Conducción (BC) en la parte superior y la Bandas de Valencia (BV) en la parte inferior que están delimitadas por una línea roja conocida como energía de Fermi.

En la estructura de bandas calculada con GGA, Figura 7a) izquierda, se observa que no existe brecha prohibida en la perovskita de  $\text{GdFeO}_3$ , la densidad de estados (Figura 7a) concuerda con la estructura de bandas, confirmando que se trata de un material conductor. Para el caso del cálculo de estructura de bandas con LDA (Figura 7b), se observa un resultado semejante al de la aproximación GGA, dado que el punto de transición en la banda de valencia localizado en el punto  $\Gamma$  supera la energía de Fermi propiciando una brecha nula.





**Figura 7.** Gráfico de estructura de bandas y densidad de estados (DOS) de los pseudopotenciales GGA y LDA para el sistema  $\text{GdFeO}_3$ .

Por el contrario, de acuerdo con los resultados experimentales y computacionales reportados por Zhu y colaboradores (Zhu, 2017), la estructura ortorrómbica muestra un comportamiento semiconductor con una brecha prohibida de aproximadamente 0.6 eV, por lo que podemos concluir que el comportamiento electrónico está asociado con la estructura atómica del  $\text{GdFeO}_3$ .

Tal comportamiento es reafirmado por la densidad de estados, Figura 7b) derecha, donde el pico con mayor intensidad se encuentra en la energía de Fermi, resaltando los estados electrónicos disponibles en el sistema de interés.

### c. Propiedades ópticas

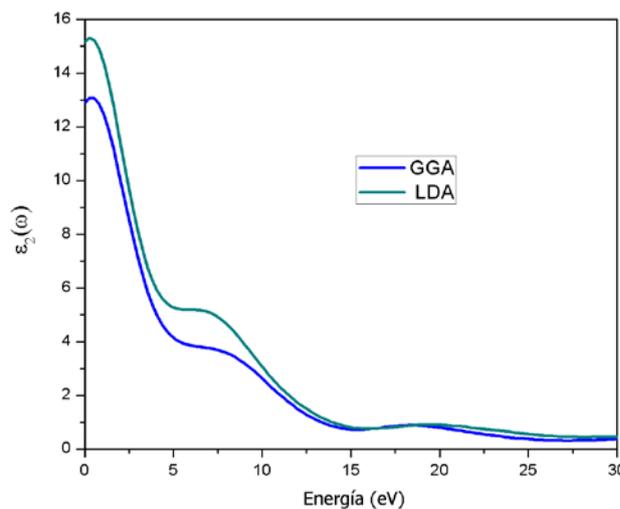
El análisis de espectroscopia óptica es una herramienta sumamente útil para determinar la estructura de la banda de energía de un material sólido (Zhu et al., 2017a). Es posible explicar que la función dieléctrica compleja está directamente relacionada con la estructura de la banda de energía de los sólidos.

La permitividad dieléctrica compleja es un parámetro constitutivo de cualquier material dieléctrico y de ella depende la interacción de la materia junto con un campo eléctrico incidente, (Rodríguez Moré et al., 2016).

Para  $\text{GdFeO}_3$  con una estructura cúbica, la Figura 8 muestra las curvas calculadas con las aproximaciones GGA y LDA de la función dieléctrica compleja (imaginaria) la cual es directamente proporcional al coeficiente de absorción del sistema. La parte imaginaria proporciona información sobre el comportamiento de absorción de  $\text{GdFeO}_3$ . La parte imaginaria de la función dieléctrica se calculó en un intervalo de energía de 0 a 30 eV. El umbral de energía de la función dieléctrica es  $E_0 = 26.426$  eV y  $E_0 = 27.942$  eV para GGA y LDA respectivamente, (Zhu et al., 2017).

Los resultados de la parte imaginaria indican que para el sistema de  $\text{GdFeO}_3$  los valores máximos de absorción están alrededor 0.377 eV para GGA, y de 0.272 para LDA.

Al comparar los dos picos de máxima intensidad en la Fig. 8 con la DOS, Figura 7, se pueden asociar estos dos picos a las



**Figura 8.** Diagrama de la parte imaginaria de tensor dieléctrico para los pseudopotenciales GGA y LDA.

transiciones interbandas entre los estados p del O en la banda de valencia a estados d del  $\text{Fe}^{3+}$  y f del Gd en la banda de conducción. El pico de absorción promedio de 0.377 eV para GGA, y de 0.272 eV para LDA, corresponde aproximadamente a la transición entre los picos localizados en DOS, a -0.350 eV para GGA y -0.240 eV para LDA, en la BV y a 2.8 eV para GGA y 1.2 eV en la BC. Por otro lado, el ancho de absorción situado entre 6-8 eV de la parte imaginaria del tensor dieléctrico, corresponde a las transiciones interbandas del  $\text{Fe}^{3+}$  y  $\text{Gd}^{3+}$  en -5 eV para GGA y -6 eV para LDA en la BV, así como a los valores energéticos en +7.2 a +8.2 eV para GGA, y +5.7 a +6.7 eV para LDA en la BC. (Valencia, 2011).

La absorción obtenida para ambos valores en GGA y LDA se encuentran un rango infrarrojo que está dada por  $10^{12}$  Hz a  $10^{14}$  Hz perteneciente a los modos vibracionales del sistema. Conforme la energía se incrementa es posible apreciar que hay una adsorción aproximada de 7.114 apreciada en GGA, mientras que para LDA es de 7.522, la cual nos confiere una absorción el rango ultravioleta y visible.

## 4. Discusión

El código de SIESTA parte de las aproximaciones empleadas, por un lado, LDA ha sido durante mucho tiempo la opción por excelencia a utilizar, debido a que funciona muy bien para una amplia variedad de materiales, especialmente por los cálculos convergentes que a menudo concuerdan con los datos experimentales, sin embargo, no es lo suficientemente precisa para describir la energía de las reacciones químicas pero que sirve como referencia para la aproximación de GGA, por ejemplo la energía de activación suele tener una sobreestimación de las energías de moléculas y sólidos de silicatos en particular. Por el contrario, GGA ha superado tales deficiencias en gran medida, dando una descripción más efectiva de las brechas energéticas en superficies metálicas y semiconductoras. De tal manera las funciones GGA dependen de la densidad local, así como de la variación espacial de la densidad.

Posterior al estudio de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la ferrita de gadolinio ( $\text{GdFeO}_3$ ) en su fase cúbica, empleando las aproximaciones GGA y LDA, se estableció la comparación de la demanda computacional y experimental mediante la proximidad y/o consistencia de los resultados obtenidos, con los reportados en trabajos anteriores. Se

encuentran distintos estudios empíricos que datan de 1954 hasta estudios computacionales del 2021, los cuales exponen las diferentes propiedades que corresponden al  $GdFeO_3$  que es dependiente de la estructura, en la Tabla 3, se indican de forma breve los resultados obtenidos de acuerdo con diferentes autores que llevaron a cabo metodologías computacionales, donde es posible identificar y comparar sus resultados con los obtenidos en el presente estudio.

**Tabla 3.** Descripción de datos y variables reportados en la literatura con métodos computacionales para la perovskita  $GdFeO_3$ .

Autores	(Paul et al., 2021)	Material project
Mallas	7x7x5	11x10x7
Parámetro de red (Å)	5.299 5.735 7.564	5.395 5.666 7.776
Código empleado	Vienna Ab-initio Simulation package (VASP)	Quantum Espresso
Estructura	Ortorrónica	Ortorrónica
Energía de Fermi (eV)	-	0
Band Gap (eV)	-	0

Los comportamientos resultantes, varían desde la malla utilizada que está dada por el método Monkhorst-Pack, hasta el parámetro de red, como ya se mencionó con anterioridad las distorsiones son el reflejo de las posiciones atómicas que confieren distorsiones en la estructura cristalina. El código también es una variable fundamental en la metodología computacional, para cada una de las aproximaciones empleadas y su diferente funcional para modelar la densidad electrónica.

De manera empírica, la literatura inicial está dada por (Geller, 1956), la cual muestra los primeros estudios experimentales para la ferrita de gadolinio, determinado una estructura que no se comporta como ortorrónica o cúbica sino más bien un conjunto de ejes ortogonales; determinado las distintas propiedades que ofrece la perovskita con respecto a la temperatura. En la Tabla 4, se presenta un resumen de los datos empíricos más sobresalientes descritos hasta la fecha de la ferrita de gadolinio.

**Tabla 4.** Descripción de datos y variables reportados en la literatura con métodos empíricos para la perovskita  $GdFeO_3$ .

Autores	(Li & Li, 2020)	(Blasco et al., 2006)
Parámetro de red (Å)	-	3.8654
Código empleado	Experimental	Experimental
Estructura	Ortorrónica	Cúbica
Energía de Fermi (eV)	0	-
Band Gap (eV)	0	-

De acuerdo con las comparativas, se encuentra una variedad de estructuras para la ferrita de gadolinio que dependen de los distintos métodos y condiciones de síntesis. Por consiguiente, este estudio, contribuye a establecer propiedades del  $GdFeO_3$  con un arreglo espacial de Pm-3m, permitiendo incrementar la información en la literatura acerca de ellas, y en gran medida las propiedades estudiadas son diferentes en comparación con las reportadas para la estructura ortorrónica, por lo que se espera que este hecho motive a la síntesis y el estudio de las propiedades electrónicas, ópticas y magnéticas de esta fase

## 5. Conclusiones

Se hizo un estudio de primeros principios usando el código SIESTA basado en la DFT empleando aproximaciones GGA y LDA para determinar las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la  $GdFeO_3$  tipo perovskita con una estructura cristalina FCC. Los resultados muestran un comportamiento conductor debido a la ausencia de una brecha energética en las dos metodologías empleadas (LDA y GGA) y con picos de absorción máximas en el rango infrarrojo y con menor intensidad en los rangos ultravioleta y visible.

Los resultados obtenidos del parámetro de red son muy similares al reportado experimentalmente, por lo que se determina que la predicción de las propiedades electrónicas y ópticas calculadas están en concordancia con las experimentales.

A partir de lo anterior es posible inferir que los métodos ab initio o de primeros principios son útiles para calcular propiedades de un material conductor o semiconductor en el cual la estructura cristalina juega un papel importante puesto que el arreglo atómico es determinante en la predicción de las demás propiedades del sistema.

## Agradecimientos

Agradecimiento del autor al CONACYT por el apoyo a Miguel Arteaga Varela por la beca otorgada en el doctorado (4192) perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales e Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería de la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo.

## Conflicto de intereses

Los autores declaran que no existen conflictos de intereses.

## Referencias

- Albadi, Y., Martinson, K. D., Shvidchenko, A. V., Buryanenko, I. V., Semenov, V. G., & Popkov, V. I. (2020). Synthesis of  $GdFeO_3$  nanoparticles via low-temperature reverse co-precipitation: The effect of strong agglomeration on the magnetic behavior. *Nanosystems: Physics, Chemistry, Mathematics*, 11(2), 252–259. <https://doi.org/10.17586/2220-8054-2020-11-2-252-259>
- Blanco, M., Fuertes, V., & Carbonio, R. (2015). Hablemos de Perovskitas. *Bitácora Digital*, 2(6), 1–8.
- Blasco, J., Stankiewicz, J., & García, J. (2006). Phase segregation in the  $Gd_{1-x}Sr_xFeO_{3-\delta}$  series. *Journal of Solid State Chemistry*, 179(3), 898–908. <https://doi.org/10.1016/j.jssc.2005.12.023>
- Chavan, S. V., & Tyagi, A. K. (2005). Nanocrystalline  $GdFeO_3$  via the gel-combustion process. *Journal of Materials Research*, 20(10), 2654–2659. <https://doi.org/10.1557/JMR.2005.0337>
- Cortés-Escobedo, C. A., Gaudisson, T., & Sánchez de Jesús, F. (2014). Obtención de la perovskita cúbica  $GdFeO_3$  por el método del polioli.

- Centro de Investigaciones En Óptica, A. C.*, 1–4.
- Geller, S. (1956). Crystal structure of gadolinium orthoferrite, GdFeO<sub>3</sub>. *The Journal of Chemical Physics*, 24(6), 2–4. <https://doi.org/10.1063/1.1742746>
- Jain, A., Ong, S. P., Hautier, G., Chen, W., Richards, W. D., Dacek, S., Cholia, S., Gunter, D., Skinner, D., Ceder, G., & Persson, K. A. (2013). Commentary: The materials project: A materials genome approach to accelerating materials innovation. *APL Materials*, 1(1). <https://doi.org/10.1063/1.4812323>
- Karoblis, D., Zarkov, A., Mazeika, K., Baltrunas, D., Niaura, G., Beganskiene, A., & Kareiva, A. (2021). YFeO<sub>3</sub>-GdFeO<sub>3</sub> solid solutions: Sol-gel synthesis, structural and magnetic properties. *Solid State Sciences*, 118, 12. <https://doi.org/10.1016/J.SOLIDSTATESCIENCES.2021.106632>
- Li, Q., & Li, J. (2020). Tunable double resonance with negative permittivity and permeability in GdFeO<sub>3</sub> material by sintering temperature. *Journal of Alloys and Compounds*, 817, 152778. <https://doi.org/10.1016/j.jallcom.2019.152778>
- Ordejón, P. (2000). Linear scaling ab initio calculations in nanoscale materials with SIESTA. *Physica Status Solidi (B) Basic Research*, 217(1), 335–356. [https://doi.org/10.1002/\(SICI\)1521-3951\(200001\)217:1<335::AID-PSSB335>3.3.CO;2-Q](https://doi.org/10.1002/(SICI)1521-3951(200001)217:1<335::AID-PSSB335>3.3.CO;2-Q)
- Paul, P., Ghosh, P. S., Rajarajan, A. K., Babu, P. D., & Rao, T. V. C. (2021). Ground state spin structure of GdFeO<sub>3</sub>: A computational and experimental study. *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*, 518, 1–18. <https://doi.org/10.1016/j.jmmm.2020.167407>
- Pliego, O. H., Rodríguez, C. S., & Contini, L. (2006). Influencia de las terminologías de la teoría de bandas sobre la aparición de desconceptos referidos a las propiedades de los metales. *Facultad de Ciencias Exactas*.
- Prakash, B. J., Rudramadevi, B. H., & Buddhudu, S. (2014). Analysis of ferroelectric, dielectric and magnetic properties of GdFeO<sub>3</sub> nanoparticles. *Ferroelectrics, Letters Section*, 41, 110–122. <https://doi.org/10.1080/07315171.2014.956020>
- Rodríguez Moré, Z. O., Lobato Morales, H., Chávez Pérez, R. A., & Medina Monroy, J. L. (2016). Estudio de la permitividad dieléctrica compleja en ron y sus mezclas con metanol, etanol y agua a frecuencia de microondas usando prueba coaxial. *Congreso Internacional de Telecomunicaciones y Telemática*, 1–18.
- Tang, P., Hu, Y., Lin, T., Jiang, Z., & Tang, C. (2014). Preparation of nanocrystalline GdFeO<sub>3</sub> by microwave method and its visible-light photocatalytic activity. *Integrated Ferroelectrics*, 153(1), 73–78. <https://doi.org/10.1080/10584587.2014.902720>
- Wu, A., Wang, Z., Wang, B., Ban, X., Jiang, L., Xu, J., Yuan, S., & Cao, S. (2014). Crystal growth and magnetic properties of GdFeO<sub>3</sub> crystals by floating zone method. *Solid State Communications*, 185, 14–17. <https://doi.org/10.1016/j.ssc.2014.01.011>
- Zhang, Y., Zheng, A., Yang, X., He, H., Fan, Y., & Yao, C. (2012). Cubic GdFeO<sub>3</sub> particle by a simple hydrothermal synthesis route and its photoluminescence and magnetic properties. *CrystEngComm*, 14(24), 8432–8439. <https://doi.org/10.1039/c2ce26233a>
- Zhu, X. H., Xiao, X. B., Chen, X. R., & Liu, B. G. (2017). Electronic structure, magnetism and optical properties of orthorhombic GdFeO<sub>3</sub> from first principles. *RSC Advances*, 7(7), 4054–4061. <https://doi.org/10.1039/c6ra25259a>

# Estudio a primeros principios de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del sistema CsSnBr<sub>3</sub> empleando el código SIESTA

## First principles study of the structural, electronic, and optical properties of de CsSnBr<sub>3</sub> system using the SIESTA code

G. Sánchez-López <sup>a</sup>, M. Arteaga-Varela <sup>b</sup>, M. A. Camacho-González <sup>a</sup>, M. I. Reyes-Valderrama <sup>b</sup>, A. Sánchez-Castillo <sup>c</sup> y V. Rodríguez-Lugo <sup>b,\*</sup>

<sup>a</sup>División de Procesos Industriales, Universidad Tecnológica de Tecámac, Carretera Federal México - Pachuca Km 37.5, CP 55740, Col. Sierra Hermosa, Tecámac, Estado de México.

<sup>b</sup>Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Pachuca-Tulancingo, Km. 8, 42184 Hgo.

<sup>c</sup>Departamento de Nanotecnología, Escuela Superior de Apan, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, Carretera Apan-Calpulalpan Km. 8, Col. Chimalpa, Apan, 43920 Hgo.

### Resumen

En el presente estudio teórico se empleó el código SIESTA; sustentado en la teoría del funcional de la densidad (DFT), para estimar las propiedades estructurales ópticas y electrónicas de la perovskita de bromuro de estaño y cesio (CsSnBr<sub>3</sub>) con estructura cúbica centrada en las caras, donde se optimizaron los parámetros para el pseudopotencial GGA (Generalized Gradient Approximation) de tipo PBE. En la primera fase del estudio se varió la función de onda de prueba siendo el valor óptimo de 100 Ry y el número de puntos de alta simetría en una malla de Monkhorst-Pack, por medio de cálculos autoconsistentes. Posteriormente, se optimizó la estructura mediante cálculos de relajamiento, obteniendo que la estructura de mínima energía posee un parámetro de red de 5.787 Å. El cálculo de la estructura de bandas y densidad de estados electrónicos (DOS), evidenció un comportamiento conductor, determinado por el traslape de bandas cerca del punto de simetría R. al nivel de la energía de Fermi. Por último, se obtuvo la parte imaginaria de la función dieléctrica la cual muestra que la absorción del sistema y los fenómenos internos a nivel molecular ocurren en el espectro UV-Vis con un máximo en 569 nm.

**Palabras Clave:** materiales, CsSnBr<sub>3</sub>, código, pseudopotencial, propiedades, Ab Initio, perovskitas.

### Abstract

In the present theoretical study, the SIESTA code was used, supported by the density functional theory (DFT), to estimate the optical and electronic structural properties of cesium tin bromide perovskite (CsSnBr<sub>3</sub>), with cubic structure centered on the faces, where the parameters were optimized for the pseudopotential GGA (Generalized Gradient Approximation) of PBE type. In the first phase of the study, the test wave function was varied, being the optimal value of 100 Ry and the number of high symmetry points in a Monkhorst-Pack mesh through self-consistency calculations. Subsequently, the structure was optimized by relaxation calculations, obtaining that the minimum energy structure has a lattice parameter of 5.787 Å. Calculation of band structure and density of electronic states (DOS) evidenced a conductive behavior determined by the overlapping of bands near the symmetry point R. at the Fermi energy level. Finally, the imaginary part of the dielectric function was obtained, which shows that the absorption of the system and the internal phenomena at the molecular level occur in the UV-Vis spectrum with a maximum at 569 nm.

**Keywords:** materials, CsSnBr<sub>3</sub>, code, pseudopotential, properties, Ab initio, perovskites.

### 1. Introducción

Debido a las necesidades de la sociedad moderna, la búsqueda de materiales que poseen características específicas es de gran importancia en la actualidad. El diseño de materiales con un alto impacto tecnológico, es el reto principal en los grupos de investigación con un propósito científico-tecnológico enfocado

en áreas específicas de aplicación industrial. En este sentido, las perovskitas son materiales con propiedades estructurales, electrónicas y ópticas muy atractivas para el desarrollo de dispositivos que mejoren la calidad de vida del ser humano y la utilidad de dispositivos tecnológicos diversos.

\*Autor para la correspondencia: ventura.rl65@gmail.com

**Correo electrónico:** tavoroyal@gmail.com (Gustavo Sánchez-López), miguelnano1@gmail.com (Miguel Arteaga-Varela), ibqmony@gmail.com (Mónica Araceli Camacho-González), isareyv@hotmail.com (María Isabel Reyes-Valderrama), ariadna\_sanchez@uaeh.edu.mx (Ariadna Sánchez-Castillo), ventura.rl65@gmail.com (Ventura Rodríguez-Lugo)

Las perovskitas son compuestos ternarios cuya fórmula química básica es  $ABO_3$ , donde A y B son cationes de diferentes tamaños. A es un catión grande y puede ser alcalino, alcalinotérreo o lantánido, y B es un catión de tamaño medio con preferencia por la coordinación octaédrica, normalmente un metal de transición. Debido a las numerosas variantes que pueden formarse por la combinación de los 3 tipos de átomos que las conforman, las perovskitas pueden ser empleadas en diferentes aplicaciones gracias a la variedad de propiedades que pueden obtenerse (V. I. Minkin, 1999), (Atienzar et al., 2013). Estos materiales muestran propiedades foto-física excepcionales, lo que las coloca por encima de los materiales semiconductores tradicionales.

La energía de banda prohibida de las perovskitas puede ajustarse a través de variaciones de tamaño y de composición (McGrath et al., 2020), debido a que son materiales cerámicos que combinan elementos metálicos con no metálicos, una disposición atómica particular, puede presentar comportamientos aislantes, superconductores, semiconductores, propiedades estructurales, etc., interesantes en el desarrollo industrial y científico (Geller, S., 1956).

Las celdas solares hechas a partir de perovskitas de la forma  $AMX_3$ , que pueden ser orgánicas o inorgánicas (donde A = Cs,  $CH_3NH_3$  o  $HC(NH_2)_2$ ; M = Pb y Sn, y X = Cl, Br, y I), tienen alta eficiencia, producción relativamente fácil y bajo costo, por estos motivos despierta un gran interés en todo el mundo. En la actualidad, experimentalmente, se encuentra disponible una amplia gama de métodos de procesamiento controlables para preparar películas delgadas, por ejemplo, mediante el método de crecimiento en fase de solución, recubrimiento por rotación, entre otras, es importante destacar que las capas de sistemas basados en “Sn” son respetuosos con el medio ambiente y los convierten en materiales interesantes para potenciales aplicaciones (Bala et al., 2018); entre ellas en metamateriales, celdas solares, etc. Estos materiales han surgido como excelentes semiconductores, con banda prohibida directa, sintonizable y como candidatos para el desarrollo de dispositivos fotovoltaicos rentables y futuristas (Bala et al., 2019).

Rajeswarapalanichamy y colaboradores, reportaron que la perovskita con fórmula química  $CsSnBr_3$ , presentó valores de parámetro de red de 5.8812 a 5.9401 Å para una estructura cúbica, con un arreglo atómico perteneciente al grupo espacial “Pm-3m (221)”, además mostró propiedades semiconductoras con una brecha prohibida directa de 1.66 eV, cuando las posiciones de la red de los átomos de Cs, Sn y Br son (0, 0, 0), (0.5, 0.5, 0.5) y (0, 0.5, 0.5); respectivamente (Rajeswarapalanichamy et al., 2020).

## 2. Metodología

En el presente trabajo, se realizó el estudio a través del código SIESTA basado en la Teoría del Funcional de la Densidad (DFT por sus siglas en inglés) para optimizar la estructura geométrica de la perovskita de Bromuro de estaño y cesio ( $CsSnBr_3$ ) usando la aproximación del gradiente generalizado (GGA) de tipo Perdew, Burke y Ernzerhof (PBE), con ayuda de archivos para describir los efectos de correlación e intercambio y una base doble zeta polarizada (Hasnip et al., 2014), (Daniel J et al., 2014), (Serway et al 2008), (Soler et al, 2002), (Krishna K. Ghose, 2019).

### 2.1. Ajuste de la energía de corte (MeshCutOff) y valor óptimo de malla

En la primera parte del estudio, se realizó el ajuste del MeshCutOff que se refiere al corte de malla. En SIESTA, el corte de malla es una energía, que corresponde a una cuadrícula 3D finita para el cálculo de densidad electrónica  $\rho(r)$  y pseudopotenciales. Dado que la densidad de electrones es una función de la posición, se necesita definir el espaciado de esta cuadrícula 3D para mapear la densidad de electrones. Un corte de malla más grande resulta en un espaciado más pequeño; con una malla 3D más densa, la simulación es más precisa, pero exige mayor tiempo de cómputo. Por lo tanto, se necesita ajustar la malla de corte lo que permite obtener un resultado confiable con el menor costo computacional. Aplicando distintas energías de corte de las funciones de onda de prueba de 100 a 400 Ry con el propósito de encontrar el valor adecuado de consistencia en las variaciones de las fuerzas atómicas totales en la dirección en la que ocurre el movimiento rígido de la estructura donde la variación entre ellas debe ser menor a  $0.1eV/\text{Å}$ , entre dichas fuerzas interatómicas.

En la Tabla 1 se muestran los datos obtenidos del movimiento rígido de la estructura, en donde se observa que a partir del criterio mencionado con anterioridad, las diferentes funciones de onda no generan una variación considerable dentro de las fuerzas interatómicas, debido a ello se determinó como valor adecuado 100 Ry, puesto que al emplear valores de función de onda posteriores (200, 300 y 400 Ry), no representarían un cambio significativo en las propiedades del sistema, asimismo, el tiempo y consumo de los recursos computacionales empleados se optimizaría de manera eficiente.

Tabla 1. Tabla de los parámetros para la función de onda de prueba de las fuerzas interatómicas.

NÚMERO DE PASOS	100 RY	200 RY	300 RY	400 RY
1	0	0	0	0
2	-0.009429	0.009039	-0.00689	-0.018128
3	-0.004383	0.011078	-0.013137	-0.022451
4	-0.002351	0.012464	-0.021113	-0.017517
5	0.014285	0.005772	-0.005367	-0.004607
6	0	0	0	0
7	-0.014285	-0.005772	0.005367	0.004607
8	0.002351	-0.012464	0.021113	0.017517
9	0.004383	-0.0011078	0.013137	0.022450
10	0.009429	-0.009039	0.006897	0.018128
11	0	0	0	0

Posteriormente, se hace el ajuste de puntos de alta simetría, mediante la malla de puntos k, con el ajuste de la malla fina, de Monkhorst-Pack, relacionados a la primera zona de Brillouin, haciendo pruebas con diferentes mallas con el propósito de definir el número mínimo de puntos k que describa de forma adecuada la red recíproca del sistema.

La Tabla 2 muestra los valores de energía correspondientes a cada malla empleada para la optimización. La malla óptima se

selecciona de tal forma que los valores de la energía total del sistema sean equivalentes a la obtenida con mallas con mayor número de puntos k. Con este criterio, puede deducirse que la malla óptima para este sistema es la de 13x13x13 puntos k.

Tabla 2. Ajuste de red de puntos k.

GGA		
MALLA.	MeshCutOff (Ry).	Energía (eV).
3X3X3	100	-18.3139
7X7X7	100	-18.3362
9X9X9	100	-18.3372
13X13X13	100	-18.3376
33X33X33	100	-18.3376

### 2.2. Optimización geométrica

Una vez que se han obtenido los valores de MeshCutOff y la malla óptima, se procede a determinar la estructura de mínima energía del sistema que corresponde a la estructura más estable, ajustando el parámetro de red y las posiciones atómicas. Como primera aproximación se usaron 5 parámetros de red para realizar la relajación estructural; partiendo del parámetro de red experimental de 5.847 Å, se definieron dos valores menores y dos mayores a este con diferencia de 0.1 Å, entre cada uno de ellos, como se muestra en el diagrama de la Figura 1.

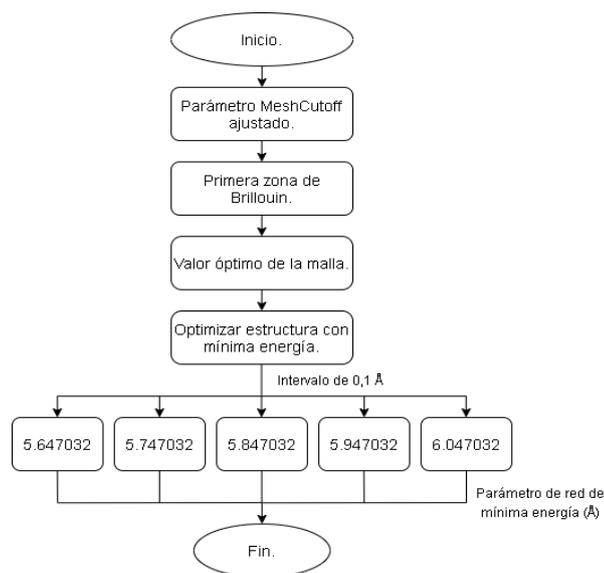


Figura 1. Diagrama de flujo correspondiente a la optimización geométrica.

Comparando los valores de las energías de las estructuras relajadas con los 5 parámetros de red mencionados, se dedujo que las estructuras con menor energía son las correspondientes a 5.747 Å y 5.847 Å, por lo que se definieron parámetros de red entre ambos valores con diferencias de 0.01 Å, como se puede observar en la gráfica de la Figura 2. Finalmente, se encontró que la estructura de menor energía tiene un parámetro de red de 5.787 Å, asimismo, las posiciones atómicas presentaron un ajuste con respecto al valor de  $a_0$  determinado, permitiendo obtener de esa forma la estructura en equilibrio para el sistema de interés.

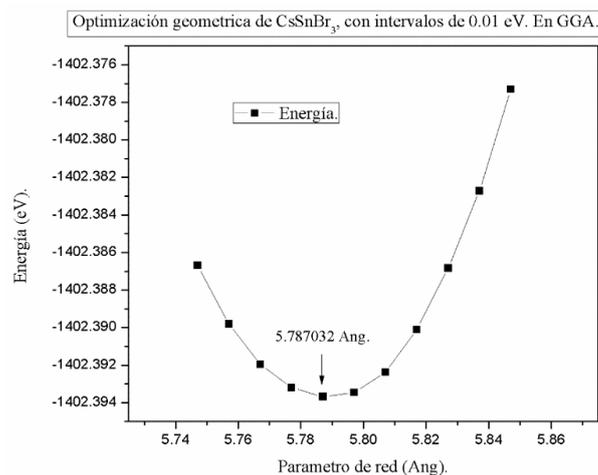


Figura 2. Convergencia de la mínima energía total del sistema respecto al parámetro de red.

### 2.3. Estructura de bandas y DOS

Después de determinar las propiedades estructurales del sistema se procede a determinar sus propiedades electrónicas a través de los cálculos de estructura de bandas y densidad de estados electrónicos (DOS), a partir de los puntos de alta simetría  $\Gamma$ , X, M, R,  $\Gamma$ , de la zona de Brillouin, que corresponde al espacio recíproco, los cuales fueron analizados para definir la banda prohibida teórica del material en su fase cúbica optimizada. La teoría de bandas conocida así por la física del estado sólido; describe la estructura electrónica de un material y el DOS; describe el número de estados disponibles en los orbitales atómicos, que pueden ocupar los electrones, proyectados en un espacio recíproco (L. K. Lamontagne, 2018).

### 2.4. Parte imaginaria del tensor dieléctrico

El último cálculo que se realiza, tiene como propósito determinar las propiedades ópticas del sistema en el que se establece el espectro de absorción del bromuro de estaño y cesio ( $\text{CsSnBr}_3$ ), siendo determinado por la parte imaginaria del tensor dieléctrico, para lo cual se ajustan parámetros añadiendo el bloque “optical calculations” mediante el ajuste del “Optical Broaden” entre valores de 0.02 a 0.20 Ry incrementando entre cada cálculo 0.02 Ry, asimismo, se realiza la determinación de la “malla óptica” (ajena a la empleada en la optimización geométrica), esta malla se ajusta desde una de 5x5x5 hasta una correspondiente a 50x50x50 en cada valor de Broaden buscando determinar el máximo de absorción, resultando como valor óptimo en el apartado de Broaden 0.20 Ry (0.147 eV) y para la malla óptica 50x50x50, debido a que a estos valores la curva de absorción no presenta grandes modificaciones con las previas resultantes.

## Resultados

### 2.5. Propiedades estructurales

En el presente estudio se obtuvo una red en la que se minimiza la energía del sistema (equilibrio) de 5.787 Å. El bromuro de estaño y cesio ( $\text{CsSnBr}_3$ ), se muestra en la Figura 3, presenta los átomos de cesio en los vértices, el estaño en el centro de la estructura cristalina y los átomos de bromo en las caras, en una estructura cúbica optimizada.

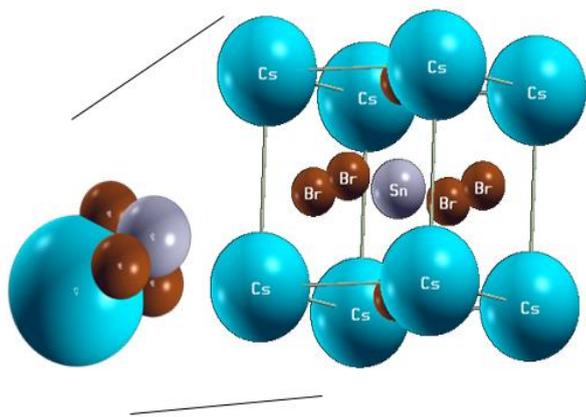


Figura 3. Estructura cristalina de perovskita de bromuro de estaño y cesio.

### 2.6. Propiedades electrónicas

Las propiedades electrónicas, se determinaron mediante la estructura de bandas y densidad de estados. Se utilizó como ruta, los puntos k de alta simetría de la zona de Brillouin que puede observar en la Tabla 3.

Tabla 3 Puntos de alta simetría en la red recíproca.

PUNTO	COORDENADAS EN EL ESPACIO RECÍPROCO		
<b>GAMMA</b>	0.00000	0.00000	0.00000
<b>X</b>	0.50000	0.00000	0.00000
<b>M</b>	0.50000	0.50000	0.00000
<b>R</b>	0.50000	0.50000	0.50000
<b>GAMMA</b>	0.00000	0.00000	0.00000

La estructura de bandas y la Densidad de Estados Electrónicos (DOS) del compuesto CsSnBr<sub>3</sub> se muestra en la Figura 4, donde se observa que el material presenta un comportamiento conductor debido a que entre las dos regiones que definen la banda de conducción (BC) en la parte superior y la banda de valencia (BV) en la parte inferior, están delimitadas por la energía de Fermi, en donde hay un traslape cerca del punto de simetría R. La densidad de estados concuerda con la estructura de bandas confirmando que el material presenta un comportamiento conductor. Sin embargo, los estados próximos a la energía de Fermi muestran un mínimo de estados electrónicos disponibles para la banda de valencia y de conducción, al mostrar una disminución en los picos de densidad de estados a dichas energías.

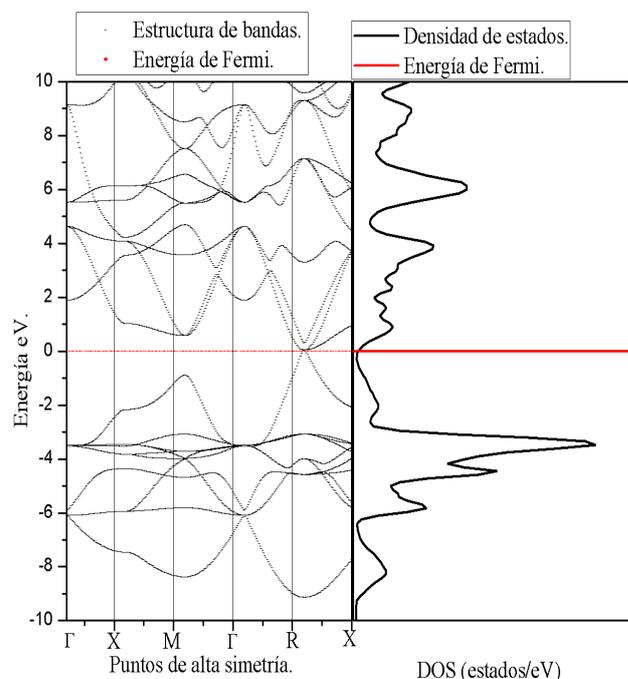


Figura 4. Estructura de bandas electrónicas y DOS.

### 2.7. Propiedades ópticas

La descripción de las propiedades ópticas se realizó a partir de la parte imaginaria de la función dieléctrica, debido a que está relacionada directamente con la absorción del sistema, donde se observa que el material presenta un pico de absorción cerca del espectro UV-Vis (ultravioleta-visible), aproximadamente a 2.176 eV (569 nm) como se aprecia en la Figura 5.

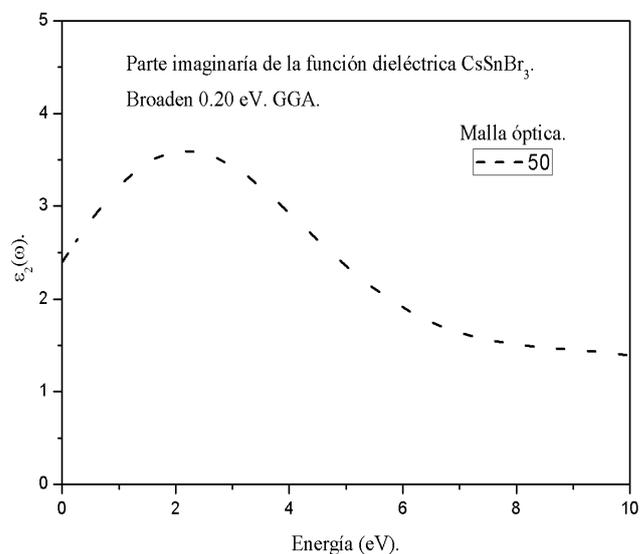


Figura 5. Curva de la función dieléctrica.

## 3. Discusión

Los resultados obtenidos en el presente estudio demuestran que el material presenta una subestimación en la propiedad electrónica del sistema comparado con los de otras investigaciones mencionadas en la literatura, un ejemplo de ello se aprecia en la Tabla 4 donde se observan datos

correspondientes a la optimización geométrica de diferentes estudios “Ab Initio” de la perovskita bromuro de estaño y cesio respecto a los parámetros de red, donde se aprecia de manera breve las pequeñas diferencias entre estos valores (Zheng, J.C. et al., 1999).

Tabla 4 Comparación de constante de red de CsSnBr<sub>3</sub>, respecto a los estudios y el presente trabajo, de estructuras cúbicas.

AUTOR	PARÁMETRO DE RED (Å)
JIN-CHENG Y COLABORADORES	5.804
PERSSON, KRISTI	5.886
PRESENTE ESTUDIO	5.787

Resultados obtenidos en trabajos anteriores determinan que es un material semiconductor con brecha de banda directa; “Persson, Kristi” (entre otros), en su diagrama de estructura de bandas y densidad de estados se observa un band-gap directo; inclusive se nota que el acercamiento de las bandas, tanto, en el punto máximo de la banda de valencia, respecto a la energía de Fermi, como el punto mínimo de la banda de conducción, en el punto de alta simetría M, existe una transición electrónica directa, con una brecha de banda de 2.385 eV (esta es la brecha más grande) y un DOS similar al obtenido, en todos los casos la banda de valencia muestra mayor dispersión, aunque en ambos lados hay pocos espacios (Persson, Kristin, 2014). En la Tabla 5 se observa el comportamiento de la brecha de energía reportada por diferentes autores (Ma, C. G. et al., 2018), (Alyoubi, R. Y. et al, 2021), (Benyahia, K et al, 2021) y el obtenido en el presente trabajo demuestra la subestimación de dicho material, ya que el material presenta un comportamiento totalmente conductor.

Tabla 5 Comparación de brechas energéticas de diferentes autores.

AUTORES	BRECHA ENERGÉTICA	ESTRUCTURA	CÓDIGO UTILIZADO
JIN-CHENG ZHENG	0.42 eV	Cúbica	UPS y XPS
KRASNENKO	0.627 eV	Cúbica	CASTEP
ALYOUBI	0.2 eV	Cúbica	Wien2k
ANU BALA	~ 1eV	Cúbicas y ortorrómbicas	VASP
BENYAHIA	0.5375 eV	Cúbica	
PRESENTE TRABAJO	0 eV	Cúbica	SIESTA

#### 4. Conclusiones

El estudio con el código SIESTA y la aproximación GGA, respecto al material en bulto de bromuro de estaño cesio (CsSnBr<sub>3</sub>) en fase cúbica, demuestra que, las propiedades estructurales obtenidas son muy precisas.

Las propiedades electrónicas, demuestran que es un material conductor, debido a la ausencia de una brecha energética, en el máximo de la banda de valencia y el mínimo de la banda de conducción que se solapan al nivel de la energía de Fermi, en el punto de alta simetría R, aunque con pocos estados electrónicos disponibles.

Asimismo, la parte imaginaria de la función dieléctrica, muestra que material presenta un pico de absorción a 2.176 eV correspondiente al espectro ultravioleta-visible.

#### Agradecimientos

Se agradece al CONACYT por el apoyo otorgado mediante la beca asignada a Miguel Arteaga Varela en el programa Doctorado Tradicional 4192.

#### Conflicto de intereses

Los autores declaran que no existen conflictos de intereses.

#### Referencias

- Alyoubi, R. Y., Raffah, B. M., Hamioud, F., & Mubarak, A. A. (2021). Efecto de la presión sobre los caracteres mecánicos, electrónicos y ópticos de CsSnBr<sub>3</sub> y CsSnI<sub>3</sub>: estudio ab-initio. *Física moderna Letra B*, 35(3), 1–17.
- Atienzar, P., & Bisquert, J. (n.d.). (2013). La Perovskita, futuro cierto de las energías renovables Del silicio a la perovskita Propiedades y aplicaciones, 1–4.
- Bala, A., & Kumar, V. (2019). Stability of the Eu<sup>2+</sup> Dopant in CsPbBr<sub>3</sub> Perovskites: A First-Principles Study [Research-article]. *Journal of Physical Chemistry*.
- Bala, A., Deb, A. K., & Kumar, V. (2018). Atomic and Electronic Structure of Two-Dimensional Inorganic Halide Perovskites A<sub>n+1</sub>M<sub>n</sub>X<sub>3n+1</sub> (n = 1-6, A = Cs, M = Pb and Sn, and X = Cl, Br, and I) from ab Initio Calculations. *Journal of Physical*.
- Benyahia, K., Bouchikh, S., & Souyah, M. E. A. (2021). Cálculos ab-initio de estructura y propiedades electrónicas de la perovskita de haluro ternario CsSnBr<sub>3</sub> en sus tres fases: estudio comparativo. *Nuevas ideas sobre ciencia y tecnología* vol. 10, 128-134
- Daniel, J., & Pérez, A. (2014). Métodos de simulación molecular: Una revisión de las herramientas más actuales. 24(2), 117–127.
- Geller, S. (1956). Crystal structure of gadolinium orthoferrite, GdFeO<sub>3</sub>. *The Journal of Chemical Physics*, 24(6), 2–4.
- Hasnip, P. J., Refson, K., Probert, M. I. J., Yates, J. R., Clark, S. J., & Pickard, C. J. (2014). Density functional theory in the solid state. *Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*.
- Krishna K.Ghose, A. B. (2019). Electronic Structure and high-temperature thermochemistry of BaZrO<sub>3</sub> perovskite from first principles calculations. *Royal Society of Chemistry*, 5-10.
- L. K. Lamontagne. (2018). “Band Structures and the Meaning of the Wave Vector k”, *Lect. Notes*, vol. 1, núm. 6, pp. 1–9.
- Ma, C. G., Krasnenko, V., & Brik, M. G. (2018). Cálculos de primeros principios de diferentes terminaciones de superficie (001) de tres perovskitas cúbicas CsCaBr<sub>3</sub>, CsGeBr<sub>3</sub> y CsSnBr<sub>3</sub>. *Revista de física y química de sólidos*, 115(001), 289–299.
- McGrath, F., Ghorpade, U. V., & Ryan, K. M. (2020). Síntesis y control dimensional de nanocristales de perovskita CsPbBr<sub>3</sub> utilizando ligandos basados en fósforo.
- Persson, Kristin (2014), Estados Unidos, datos de materiales sobre CsSnBr<sub>3</sub> (SG:221) por materiales de proyecto, Datos de materiales computados utilizando cálculos de teoría funcional de densidad.
- Rajeswarapalanichamy, R., Amudhavalli, A., Padmavathy, R., & Iyakutti, K. (2020). Band gap engineering in halide cubic perovskites CsPbBr<sub>3-y</sub> (y = 0, 1, 2, 3) – A DFT study. *Materials Science and Engineering B: Solid-State Materials for Advanced Technology*, 258(June 2018), 114560.
- Serway and Jewett. (2008). *Física para ciencias e ingeniería con física moderna*. México: Cengage Learning, Inc.
- Soler, J. M., Artacho, E., Gale, J. D., García, A., Junquera, J., Ordejón, P., & Sánchez-Portal, D. (2002). The SIESTA method for ab initio order-N materials simulation. *Journal of Physics Condensed Matter*, 14(11), 2745–2779.
- V. I. Minkin. (1999) “Glossary of terms used in theoretical organic chemistry (IUPAC Recommendations 1999)”, *Pure Appl. Chem.*, vol. 71, núm. 10, pp. 1919–1981.
- Zheng, J. C., Huan, C. H. A., Wee, A. T. S., & Kuok, M. H. (1999). Propiedades electrónicas de CsSnBr<sub>3</sub>: Estudios por experimento y teoría. *Análisis de superficie e interfaz*.

## Determinación de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de siliceno, germaneno y sistema Si-Ge mediante DFT

### Determination of the structural, electronic, and optical properties of silicene, germanene, and the Si-Ge system using DFT (Density Functional Theory)

R. Flores-Cruz <sup>a</sup>, M. Arteaga-Varela <sup>a</sup>, A. de J. Herrera-Carbajal <sup>b</sup>, A. Sánchez-Castillo <sup>b</sup>  
M. I. Reyes-Valderrama <sup>a</sup>, V. Rodríguez-Lugo <sup>a,\*</sup>

<sup>a</sup> Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 42184, Pachuca, Hidalgo, México.

<sup>b</sup> Departamento de Nanotecnología, Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo, 43920 Apan, Hidalgo, México.

#### Resumen

En este estudio se determinaron las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de un conjunto de láminas bicapa de silicio, germanio y la aleación de ambas. El estudio se sustenta en la teoría de los funcionales de la densidad y su implementación en este trabajo se llevó a cabo mediante el código de *Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms* (SIESTA). Se utilizó un pseudopotencial de gradiente generalizado tipo Perdew–Burke–Ernzerhof (GGA-PBE). En la primera parte del estudio se realizó la optimización de la función de onda de prueba y la malla de puntos K por medio del algoritmo Monkhorst-Pack en la primera zona de Brillouin, elaborando la optimización estructural para determinar los parámetros de red que minimizan la energía del sistema, obteniendo para el siliceno los parámetros de red siguientes  $a=b= 3.819 \text{ \AA}$ , y para el germaneno fueron de  $a=b= 4.035283 \text{ \AA}$ . En la segunda parte del estudio se estableció el comportamiento electrónico de los sistemas mediante su estructura de bandas y densidad de estados, donde se determinó un comportamiento conductor para todos los sistemas, uniéndose la banda de valencia y de conducción en el punto de alta simetría K, mostrando la presencia de los conos de Dirac. Finalmente se determinó la parte imaginaria de la función dieléctrica donde se aprecian picos de absorción a diferentes niveles de energía, asociados a fenómenos electrónicos en el sistema tales como absorción UV-visible y transiciones entre bandas.

**Palabras Clave:** Siliceno, Germaneno, DFT, GGA, estudio teórico.

#### Abstract

In this study, the structural, electronic, and optical properties of a set of bilayer sheets of silicon, germanium and the alloy of both were determined. The study is based on the theory of density functionals and its implementation in this work was carried out using the Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousands of Atoms (SIESTA) code. A Perdew–Burke–Ernzerhof type generalized gradient pseudopotential (GGA-PBE) was used. In the first part of the study, the optimization of the test wave function and the K-point mesh was carried out by means of the Monkhorst-Pack algorithm in the first Brillouin zone, developing the structural optimization to determine the network parameters that minimize the energy of the system, obtaining for silicene the following network parameters  $a=b= 3.819 \text{ \AA}$ , and for germanene they were  $a=b= 4.035283 \text{ \AA}$ . In the second part of the study, the electronic behavior of the systems was established through their band structure and density of states, where conductive behavior was determined for all systems, joining the valence and conduction band at the point of high K symmetry, showing the presence of Dirac cones. Finally, the imaginary part of the dielectric function was determined where absorption peaks are seen at different energy levels, associated with electronic phenomena in the system such as UV-visible absorption and transitions between bands.

**Keywords:** Silicene, Germanene, DFT, GGA, Theoretical Study.

#### 1. Introducción

El estudio de los nanomateriales ha acaparado la atención de muchos investigadores, esto debido a las propiedades que

presentan respecto a los macromateriales, tal y como menciona (Rodríguez et al., 2008). El uso de esta clase de materiales supone una apertura a la innovación y mejora de la tecnología actual.

\*Autor para la correspondencia: [ventura.rl65@gmail.com](mailto:ventura.rl65@gmail.com)

**Correo electrónico:** [fl335558@uaeh.edu.mx](mailto:fl335558@uaeh.edu.mx) (Rommel Flores-Cruz), [miguelnano1@gmail.com](mailto:miguelnano1@gmail.com) (Miguel Arteaga Varela), [alejandro\\_herrera@uaeh.edu.mx](mailto:alejandro_herrera@uaeh.edu.mx) (Alejandro de Jesús Herrera-Carbajal), [ariadna\\_sanchez@uaeh.edu.mx](mailto:ariadna_sanchez@uaeh.edu.mx) (Ariadna Sánchez-Castillo), [profe\\_5490@uaeh.edu.mx](mailto:profe_5490@uaeh.edu.mx) (María Isabel Reyes-Valderrama) y [ventura.rl65@gmail.com](mailto:ventura.rl65@gmail.com) (Ventura Rodríguez-Lugo)

**Historial del manuscrito:** recibido el 26/09/2023, última versión-revisada recibida el 31/10/2023, aceptado el 01/11/2023  
Publicado el 15/12/2023. DOI: <https://doi.org/10.29057/icbi.v11iEspecial5.11765>



Desde el año 2004 con el descubrimiento del grafeno por los investigadores Geim y Novoselov, se han estudiado este tipo de materiales. Esto se debe a que como afirma (Naumis, G., 2010), el grafeno posee una movilidad de electrones diez veces superior a la de los conductores comúnmente utilizados.

Además, en cuanto a propiedades mecánicas también presentan indicios de ser muy superior a los materiales convencionales, ya que si se compara con un acero es hasta 100 veces más resistente (considerando el mismo espesor en ambos materiales). Es más duro que el diamante, químicamente inerte y es biocompatible.

Por esta razón la investigación de nanomateriales bidimensionales se ha extendido a más elementos de la tabla periódica y no únicamente a los alótropos del carbono (el grafeno). Como es el caso de materiales bidimensionales obtenidos a partir de elementos pertenecientes al mismo grupo del carbono, tal y como lo son el silicio, germanio y estaño, que dan lugar al siliceno, germaneno y estaneno. Su alótropo bidimensional respectivamente.

El siliceno se espera que tenga no solo las mismas propiedades que su análogo el grafeno, sino que también dé la oportunidad de abrir nuevos campos de aplicación, como señala (del Rayo et al., 2013), mismo caso se esperaría de materiales como el germaneno.

Tanto el siliceno y el germaneno presentan un ordenamiento hexagonal en su estructura, al igual que el grafeno, pero no con la misma estabilidad, debido a su diferencia en la capacidad para formar enlaces dobles. En el caso del grafeno, al estar compuesto por átomos de carbono posee una estructura bidimensional más estable, caso contrario que el siliceno, que en su estructura bidimensional posee átomos en diferente plano, haciéndolo inestable.

Sin embargo, la limitante que existe para analizar esta clase de materiales bidimensionales de manera experimental puede ser sustituida por un estudio teórico sustentado en la teoría del funcional de la densidad. Y con el apoyo de la computación y programas de simulación molecular, pueden estudiarse esta clase de estructuras.

En el presente trabajo se desarrolla un estudio teórico computacional en el que se determinaron las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del siliceno, germaneno y un sistema combinado de átomos de silicio y germanio en una red bidimensional con las posiciones intercaladas, fue realizado implementando el código SIESTA el cual está sustentado en la teoría del funcional de la densidad (DFT por sus siglas en inglés) y mediante el empleo de un pseudopotencial de aproximación de gradiente generalizado (GGA) del tipo PBE.

## 2. Metodología

### 2.1. Optimización de la función onda de prueba

En esta investigación se realizó la optimización de la función de onda de prueba, con energías de corte de 50 Ry incrementando en intervalos de 50 Ry hasta una energía de corte de 250 Ry, los datos obtenidos se muestran en las Tablas 1, 2 y 3.

Estos datos sirven para determinar el valor de la energía de corte más conveniente para continuar con el estudio, siguiendo un criterio en el que se selecciona el valor en el que la variación sea menor a 0.1 eV/Å. Para los tres sistemas se seleccionó el

valor de 150 Ry bajo este mismo criterio, así como para generar una mayor precisión en los cálculos.

Tabla 1: Optimización de la función de onda para el siliceno ("D" Desplazamiento).

D	50 Ry	100 Ry	150 Ry	200 Ry	250 Ry
0	0	0	0	0	0
0.2413125	-0.000022	-0.000771	0.000056	0.000003	-0.000062
0.482625	0.000834	-0.00049	0.000075	0.000311	-0.000012
0.7239375	0.000255	-0.000391	-0.000082	-0.000087	0.000017
0.96525	0.000111	-0.000194	-0.000082	-0.000087	0.000017
1.2065625	0.000109	0.000098	0.000035	-0.000209	0.000066
1.447875	0.000193	0.000193	-0.000067	0.000073	0.000096
1.6891875	0.000148	0.000417	-0.000121	0.000174	-0.000052
1.9305	-0.001272	0.000214	-0.000046	0.000157	-0.000040
2.1718125	-0.000274	0.000616	0.000075	0.000179	0.000009
2.413125	-0.000498	-0.000343	0.000091	-0.000111	-0.000187

Tabla 2: Optimización de la función de onda para el germaneno ("D" Desplazamiento).

D	50 Ry	100 Ry	150 Ry	200 Ry	250 Ry
0	0	0	0	0	0
0.2492875	0.000498	-0.00035	-0.00013	0.000184	-0.000105
0.498575	0.000638	-0.000229	-0.000259	-0.000102	-0.000188
0.7478625	0.000159	-0.000515	-0.000383	-0.00013	-0.000049
0.99715	-0.001727	-0.000335	0.00023	0.000187	-0.000139
1.2464375	-0.000025	0.000182	0.000083	-0.000167	0.000139
1.495725	0.001158	0.000705	0.000566	0.000153	0.000018
1.7450125	-0.000193	0.0000435	0.0000419	0.000043	0.000096
1.9943	0.000216	0.000205	-0.000061	0.000211	0.000096
2.2435875	-0.000543	0.000106	-0.0001	0.000193	0.000096
2.492875	0.000543	-0.000628	-0.000043	-0.000108	0.000096

Tabla 3: Optimización de la función de onda para el sistema Si-Ge ("D" Desplazamiento).

D	50 Ry	100 Ry	150 Ry	200 Ry	250 Ry
0	0	0	0	0	0
0.2413125	-0.00288	0.000649	-8.8 E-5	-2.54 E-4	-3.78 E-4
0.482625	-0.00249	0.00101	-2.19 E-4	-3.49 E-4	-5.48 E-4
0.7239375	-0.00327	0.00151	-4.4 E-5	-2.46 E-4	-3.54 E-4
0.96525	-0.00394	0.0016	-3.52 E-4	-2.83 E-4	-1.72 E-4
1.2065625	-0.00382	0.00127	-7.06 E-4	-1.5 E-4	-4.01 E-4
1.447875	-0.00398	0.00119	-2.34 E-4	-1.12 E-4	-5.55 E-4
1.6891875	-0.00331	3.81 E-4	-4.4 E-5	-4.12 E-4	-6.69 E-4
1.9305	-0.00337	6.47 E-4	-2.5 E-5	-2.95 E-4	-1.28 E-4
2.1718125	-0.00265	0.00132	-1.34 E-4	-3.18 E-4	-1.75 E-4
2.413125	-0.00344	0.00157	-6.01 E-4	-9 E-5	-4.01 E-4

## 2.2. Ajuste de puntos de alta simetría

Dependiendo del valor de energía de corte en Ry, se hace una nueva secuencia de cálculos manteniendo constante el valor de energía seleccionado, pero variando los valores de las mallas con valores 3 x 3 x 1, 5 x 5 x 1, 7 x 7 x 1, 9 x 9 x 1, 11 x 11 x 1 y 13 x 13 x 1, para este caso. En la Tabla 4 se muestran los resultados obtenidos con sus valores de energía para cada malla.

Tabla 4: Tabla de ajuste de puntos de alta simetría para los tres sistemas.

Siliceno		Germaneno		Sistema Si-Ge	
Malla	Energía (eV)	Malla	Energía (eV)	Malla	Energía (eV)
3x3x1	214.129	3x3x1	228.372	3x3x1	221.119
5x5x1	214.034	5x5x1	228.256	5x5x1	221.012
7x7x1	214.019	7x7x1	228.238	7x7x1	220.995
9x9x1	214.021	9x9x1	228.239	9x9x1	220.997
11x11x1	214.020	11x11x1	228.237	11x11x1	220.996
13x13x1	214.020	13x13x1	228.237	13x13x1	220.995

Se considera el valor de la energía en el que existe menos variación respecto a los demás, gráficamente esto sería el valor en el que la función se mantiene constante, para todos los sistemas se ocupó la malla 9 x 9 x 1.

## 2.3. Optimización estructural

Conociendo los valores de la malla óptima es posible determinar los parámetros de red que minimizan la energía para cada sistema, tomando como parámetros iniciales los valores experimentales.

En la Tabla 5 se observan los parámetros de red calculados siguiendo el procedimiento antes mencionado, variando los parámetros de red 0.01 Å y 0.001 Å.

Tabla 5: Parámetros de red calculados.

Sistema	Siliceno	Germaneno	Si-Ge
Parámetro a (Å)	3.8198	4.0353	3.9229
Parámetro b (Å)	3.8198	4.0354	3.9229
$\alpha$	90.01	89.70	89.92
$\beta$	89.97	90.30	90.07

## 2.4. Propiedades electrónicas

Una vez optimizado el sistema, se toman estos parámetros para proceder con el cálculo de las bandas de energía y densidad de estados, utilizando cuatro puntos de alta simetría  $\Gamma$ , K, M,  $\Gamma$ . Como menciona (Rojas et al., 2013) el band gap permite que se clasifiquen los materiales de acuerdo con la teoría de bandas en aislantes, conductores y semiconductores.

## 2.5. Propiedades ópticas

En la parte final del estudio se realizó el cálculo de la parte imaginaria de la función dieléctrica, donde se calcularon valores de optical Broaden de 0.02 Ry, 0.04 Ry, 0.06 Ry, 0.08 Ry y 0.01 Ry, para los diferentes valores de optical mesh 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35, 40, 45 y 50.

## 3. Resultados

Los tres sistemas estudiados correspondientes al siliceno, germaneno y un sistema combinado con átomos intercalados de silicio y germanio forman una estructura bidimensional del tipo hexagonal, como se observa en la Figura 1.

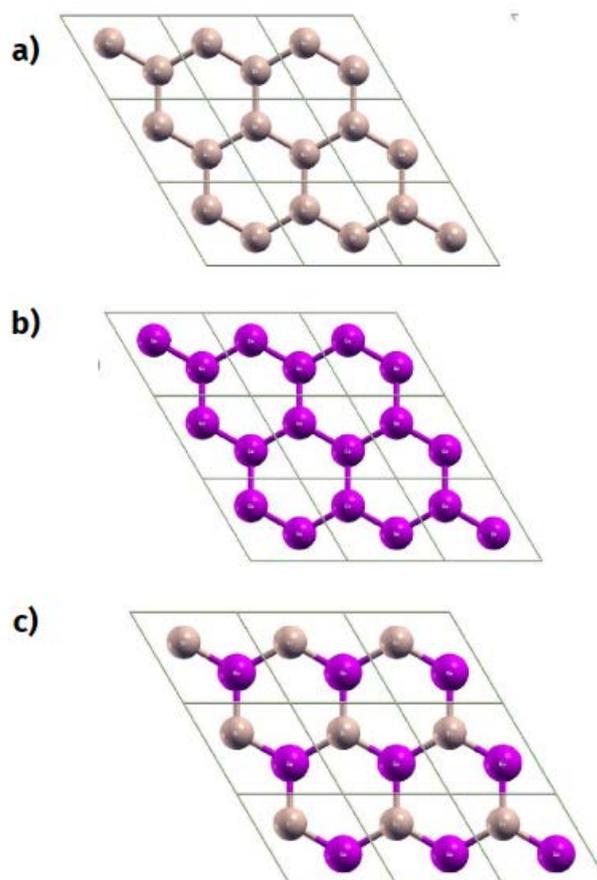


Figura 1: Estructuras cristalinas estudiadas: a) Siliceno, b) Germaneno y c) Estructura combinada Si-Ge

### 3.1. Propiedades electrónicas sistemas Siliceno, Germaneno y Si-Ge

El cálculo de las propiedades electrónicas se realizó mediante la estructura de bandas de energía y la densidad de estados (DOS).

En la gráfica de bandas del siliceno puede observarse un comportamiento metálico como se ilustra en la Figura 2, esto debido a que el máximo de la banda de valencia se sobrepone con el mínimo de la banda de conducción en el punto de alta simetría K, dentro de materiales bidimensionales como el grafeno y por consiguiente los estudiados en el presente trabajo se le conoce como conos de Dirac. Los hexágonos del siliceno

y germaneno en forma de panel de abeja dan lugar a bandas de niveles de energía que tienen forma de dos conos que se tocan por el vértice. Los electrones que están cerca del vértice se comportan como partículas sin masa que viajan a la velocidad de la luz, como los fotones, en dos dimensiones.

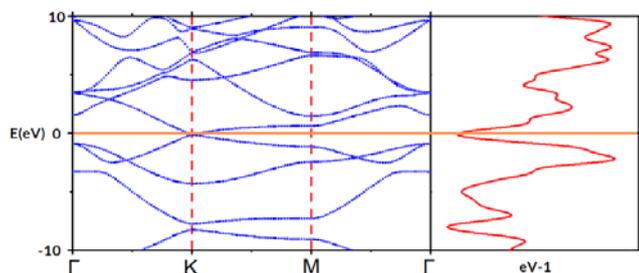


Figura 2: Gráfico de bandas y densidad de estados para el siliceno.

Para el germaneno el comportamiento esperado debe ser similar al del siliceno ya que los átomos que componen la estructura pertenecen al mismo grupo de la tabla periódica. Observando el gráfico de bandas en la Figura 3 el germaneno presenta, por lo tanto, un comportamiento metálico, presentando en el mismo punto de alta simetría los conos de Dirac.

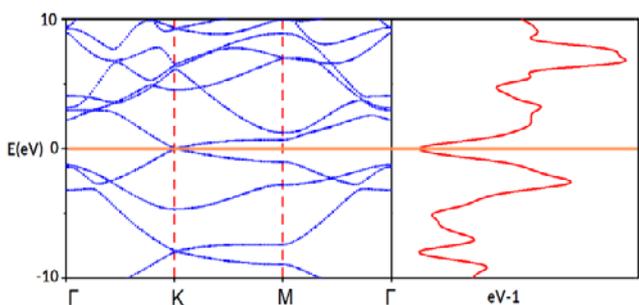


Figura 3: Gráfico de bandas y densidad de estados para el germaneno

Para la simulación del sistema combinado se eligió la malla  $9 \times 9 \times 1$  y se obtuvo un gráfico como el que se muestra en la Figura 4, donde se presenta una mayor cantidad de estados electrónicos en la banda de conducción, esto debido a que se presentan dos elementos en igual proporciones dentro de la red bidimensional, sin embargo el comportamiento conductor que presentaban los sistemas por separado se mantienen en este sistema combinado, presentado un solapamiento entre ambas bandas en el punto K.

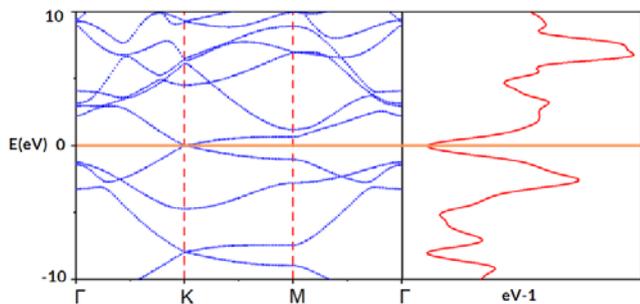


Figura 4: Gráfico de bandas y densidad de estados para el sistema Si-Ge.

### 3.2. Propiedades ópticas sistemas Siliceno, Germaneno y Si-Ge

Se realizó la polarización en el eje “xy” en el eje y, el gráfico de absorción del siliceno mostrado en la Figura 5 muestra la energía en el eje “x” y la frecuencia de absorción en el eje “y”, en este caso presenta dos picos de absorción, el primero con absorción en 0.2176 eV correspondiente a una longitud de onda de 3797.9 nm y que en el espectro electromagnético se encuentra en la región del infrarrojo medio, conforme se incrementa la energía no presenta picos de absorción hasta el valor de 4.2450 eV que es equivalente a una longitud de onda de 292.10 nm en el rango de ultravioleta medio, el gráfico muestra un intervalo de energía de 0 a 10 eV por lo que no considera posible picos de absorción a baja frecuencia.

En el caso del germaneno presenta tres picos de absorción en un intervalo de 0 a 5 eV, pasando de 5 eV no tiene ningún otro pico, característica que comparte con el siliceno, el pico más alto en frecuencia se encuentra en 0.2176 eV y con una longitud de onda de 5696.1 nm en el rango de infrarrojo medio, los siguientes dos picos se encuentran en una frecuencia parecida, el primero de ellos tiene una frecuencia un poco menor con una energía de 1.6326 eV y 759.48 nm el siguiente pico que se observa en el gráfico está en 3.5919 eV y una longitud de onda de 345.21 nm, el rango de absorción de estos dos picos están en el infrarrojo cercano y el UV cercano respectivamente, como se ilustra en la Figura 6.

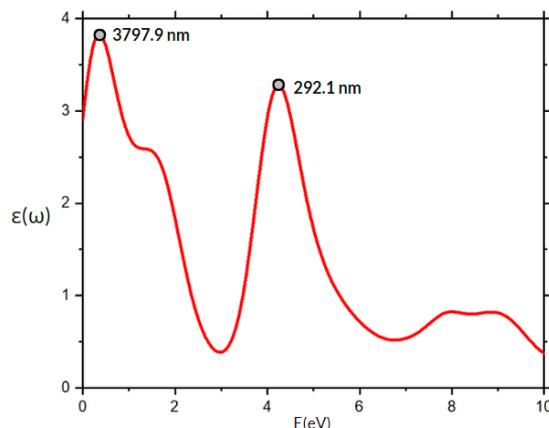


Figura 5: Gráfico de propiedades ópticas del siliceno (polarizado en el eje x y en el eje y).

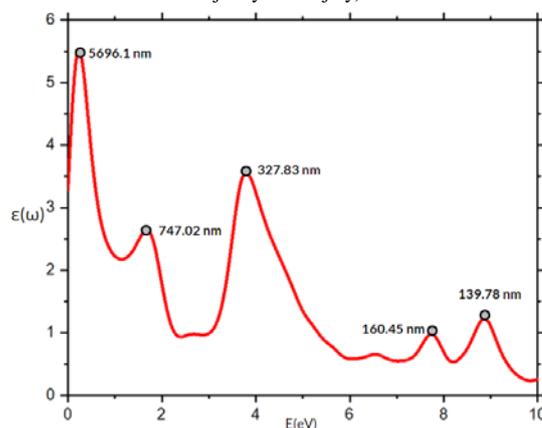


Figura 6: Gráfico de propiedades ópticas del germaneno siliceno (polarizado en el eje x y en el eje y).

Para el sistema combinado de silicio y germanio bidimensional se obtuvieron 5 picos de absorción en el intervalo de 0 a 10 eV con un comportamiento mayormente parecido al germaneno hasta los 5 eV, el primer pico está en 0.2175 eV y con una longitud de onda de 5696.1 nm exactamente igual al caso del germaneno, el siguiente está en 1.6599 eV y con 747.02 nm (variando por poco al del germaneno), el siguiente está en un valor energético de 3.7824 eV y 327.83 nm, con absorción en el infrarrojo medio, infrarrojo cercano y ultravioleta cercano respectivamente para los tres picos presentes, aunque dos de los tres valores de energía variaron respecto al germaneno, todos esos picos presentan un comportamiento de absorción igual al germanio bidimensional, el siguiente pico aparece en 7.7280 eV equivalente a 160.45 nm en el UV lejano y por último aparece otro en 8.8709 eV con una longitud de onda de 139.78 nm también correspondiente al UV lejano, tal y como puede verse en la Figura 7.

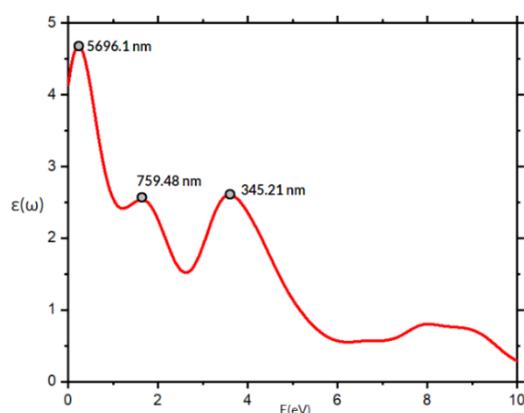


Figura 7: Gráfico de propiedades ópticas del sistema combinado Si-Ge siliceno (polarizado en el eje x y en el eje y).

#### 4. Discusión

En la Tabla 6, se muestran trabajos realizados por diferentes autores para los sistemas siliceno y germaneno, donde se obtuvieron parámetros de red muy próximos a los reportados en el presente estudio. Donde se muestra una comparación con datos obtenidos en la literatura, según los presentados por (Dimoulas A. 2015) y (Ni, Z. et al. 2012), esto muestra que la simulación a primeros principios de estos sistemas permite representar de manera óptima propiedades estructurales de los sistemas de interés.

Tabla 6: Discusión (parámetros de red).

Estructura	Trabajo actual	Debernardi, A et al. (2016)	Dimoulas, A. (2015)	Ni, Z. et al. (2012)
Parámetro de red Å (Siliceno)	3.8198	3.87	3.83	3.866
Parámetro de red Å (Germaneno)	4.0352	4.05	3.97	4.063

En cuanto a las propiedades electrónicas, comparando los presentados aquí con los obtenidos por (Cahangirov, S, et al. 2009) los comportamientos son correspondientes, mostrando la presencia de conos de Dirac en el punto de alta simetría K, donde se unen a nivel de la energía de Fermi las bandas de valencia y conducción, mostrando estos sistemas como una gran alternativa en la conducción electrónica.

#### 5. Conclusiones

La simulación computacional fundamentada en la teoría del funcional de la densidad permite realizar los cálculos de las propiedades en los materiales desde un punto de vista teórico con alto grado de precisión, incluso en materiales que en principio no son fáciles de obtener para ser estudiados experimentalmente. El uso de un código como SIESTA otorga resultados precisos y con la posibilidad de simular condiciones específicas o parámetros iniciales a conveniencia, permite además trabajar con materiales que actualmente no son muy factibles de estudiar experimentalmente, como lo es en el caso de los presentados en este trabajo que son materiales que actualmente su obtención no es posible de manera fácil como para poder estudiarlos más allá de una aproximación computacional.

Respecto a los resultados obtenidos en el presente trabajo se concluye que tanto el siliceno y germaneno presentan un comportamiento de un sistema conductor, así mismo, mediante la parte imaginaria de la función dieléctrica se muestra que el material presenta muchos fenómenos microscópicos asociados a diversas energías de absorción.

#### Agradecimientos

Se agradece al CONACYT por el apoyo otorgado mediante la beca asignada a Miguel Arteaga Varela en el programa Doctorado Tradicional 4192.

#### Referencias

- Cahangirov, S., Topsakal, M., Aktürk, E., Şahin, H., & Ciraci, S. (2009). Two- and One-Dimensional Honeycomb Structures of Silicon and Germanium. *Physical Review Letters*, 102(23). doi:10.1103/physrevlett.102.236804
- Debernardi, A., & Marchetti, L. (2016). Ab initio simulations of pseudomorphic silicene and germanene bidimensional heterostructures. *Physical Review B*, 93(24), 245426.
- Del Rayo Chávez-Castillo, M., Rodríguez-Meza, M. A., & Meza-Montes, L. (2013). Grafeno y Siliceno: una nueva vida gracias a la sutileza de los materiales bidimensionales. *CIENCIA ergo-sum, Revista Científica Multidisciplinaria de Prospectiva*, 20(2), 148-152.
- Dimoulas, A. (2015). Silicene and germanene: Silicon and germanium in the "flatland". *Microelectronic engineering*, 131, 68-78.
- Naumis, G. G. (2010). Premio Nobel 2010: el descubrimiento del grafeno. *El Gluón*, (14).
- Ni, Z., Liu, Q., Tang, K., Zheng, J., Zhou, J., Qin, R., ... & Lu, J. (2012). Tunable bandgap in silicene and germanene. *Nano letters*, 12(1), 113-118.
- Rodríguez González, C., & Kharissova, O. V. (2008). Propiedades y aplicaciones del grafeno. *Ingenierías*, 11(38), 17-23.
- Rojas, I., Mora, C., & Herrera Suarez, H. J. (2013). Bandas de energía, origen y consecuencias.



La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo  
a través de la Sociedad Mexicana de Materiales otorga el presente

# RECONOCIMIENTO

a

## G. Sánchez López

Por su participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo **“ESTUDIO TEÓRICO DE LA PEROVSKITA DE CsSnBr<sub>3</sub> FASE CÚBICA”** en el marco de actividades del **VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales** y comparte autoría con **“M. Arteaga Varela, M. A. Camacho González, Ariadna Sánchez Castillo y M. I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo.”**, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021



Mineral de la Reforma, Hidalgo., a 29 de junio de 2021.

Atentamente:

“AMOR, ORDEN Y PROGRESO”

**MTRO. MIGUEL ARTEAGA  
VARELA**  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil de Materiales  
UAEH-SMM

**DR. MÀRIUS RAMÍREZ  
CARDONA**  
Jefe del Área Académica  
de Ciencias de la Tierra y  
Materiales

**DRA. PATRICIA DEL  
CARMEN ZAMBRANO  
ROBLEDO**  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo  
a través de la Sociedad Mexicana de Materiales otorga el presente

# RECONOCIMIENTO

a

**J. P. Sánchez Anaya**

Por su participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo “**Structural and electronic behavior of PEROVSKITE BISMUTH FERRITE: a first-principles study.**” en el marco de actividades del **VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales** y comparte autoría con “**M. Arteaga Varela, J. A. García Melo, E. Salinas Rodríguez, A. Sánchez Castillo, V. Rodríguez Lugo**”, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021



Mineral de la Reforma, Hidalgo., a 29 de junio de 2021.

Atentamente:

“AMOR, ORDEN Y PROGRESO”

**MTRO. MIGUEL ARTEAGA  
VARELA**  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil de Materiales  
UAEH-SMM

**DR. MARIUS RAMÍREZ  
CARDONA**  
Jefe del Área Académica  
de Ciencias de la Tierra y  
Materiales

**DRA. PATRICIA DEL  
CARMEN ZAMBRANO  
ROBLEDO**  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo  
a través de la Sociedad Mexicana de Materiales otorga el presente

# RECONOCIMIENTO

a

**M. Arteaga Varela**

Por su participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo **“THEORETICAL STUDY OF DIELECTRIC TENSOR OF THE PEROVSKITE OF SrZrO<sub>3</sub> CUBIC PHASE AT 0, 40 AND 100 GPa”** en el marco de actividades del **VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales** y comparte autoría con **“A. de J. Herrera Carbajal, E. Salinas Rodríguez, M. I. Reyes Valderrama, A. Sánchez Castillo, V. Rodríguez Lugo”**, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021



Mineral de la Reforma, Hidalgo., a 29 de junio de 2021.

Atentamente:

**MTRO. MIGUEL ARTEAGA  
VARELA**  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil de Materiales  
UAEH-SMM

**DR. MÀRIUS RAMÍREZ  
CARDONA**  
Jefe del Área Académica  
de Ciencias de la Tierra y  
Materiales

**DRA. PATRICIA DEL  
CARMEN ZAMBRANO  
ROBLEDO**  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo  
a través de la Sociedad Mexicana de Materiales otorga el presente

## RECONOCIMIENTO

a

**B. O. Sosa Rosas**

Por su participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo **“Simulación molecular; estudio ab initio de propiedades electrónicas, estructurales y ópticas para la perovskita Ferrita de Gadolinio”** en el marco de actividades del **VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales** y comparte autoría con **“M. Arteaga Varela, M. A. Camacho González, A. de J. Herrera Carbaja, M. I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo”**, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021



Mineral de la Reforma, Hidalgo., a 29 de junio de 2021.

Atentamente:

**“AMOR, ORDEN Y PROGRESO”**

**MTRO. MIGUEL ARTEAGA  
VARELA**  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil de Materiales  
UAEH-SMM

**DR. MÀRIUS RAMÍREZ  
CARDONA**  
Jefe del Área Académica  
de Ciencias de la Tierra y  
Materiales

**DRA. PATRICIA DEL  
CARMEN ZAMBRANO  
ROBLEDO**  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo  
a través de la Sociedad Mexicana de Materiales otorga el presente

# RECONOCIMIENTO

a

**Brayann A. García**

Por su participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo **“ESTUDIO TEÓRICO DEL TENSOR DIELECTRICO DE LA PEROVSKITA DE TITANATO DE BARIO (BATIO<sub>3</sub>)”** en el marco de actividades del **VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales** y comparte autoría con **“M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, E. Salinas Rodríguez, V. Rodríguez Lugo”**, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021



Mineral de la Reforma, Hidalgo., a 29 de junio de 2021.

Atentamente:

**“AMOR, ORDEN Y PROGRESO”**

**MTRO. MIGUEL ARTEAGA  
VARELA**  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil de Materiales  
UAEH-SMM

**DR. MARIUS RAMÍREZ  
CARDONA**  
Jefe del Área Académica  
de Ciencias de la Tierra y  
Materiales

**DRA. PATRICIA DEL  
CARMEN ZAMBRANO  
ROBLEDO**  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales



La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo  
a través de la Sociedad Mexicana de Materiales otorga el presente

# RECONOCIMIENTO

a

L. López Ortega

Por su participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo “**Calculo de las propiedades ópticas del BaZrO<sub>3</sub> a primeros principios**” en el marco de actividades del VI Simposio de Investigación en Ciencias de los Materiales y comparte autoría con “**M. Arteaga Varela, Ariadna Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, E. Salinas Rodríguez, V. Rodríguez Lugo**”, efectuado de manera virtual, organizado por el Capítulo Estudiantil de Materiales durante los días 17 y 18 de junio de 2021



Mineral de la Reforma, Hidalgo., a 29 de junio de 2021.

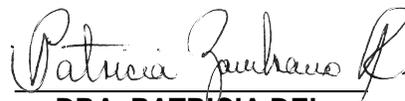
Atentamente:



**MTRO. MIGUEL ARTEAGA  
VARELA**  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil de Materiales  
UAEH-SMM



**DR. MARIUS RAMÍREZ  
CARDONA**  
Jefe del Área Académica  
de Ciencias de la Tierra y  
Materiales



**DRA. PATRICIA DEL  
CARMEN ZAMBRANO  
ROBLEDO**  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales



August 2021

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Alejandro de Jesús Herrera Carbjal, Eleazar Salinas, Ariadna Sanchez Castillo, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **THEORETICAL STUDY OF DIELECTRIC TENSOR OF THE PEROVSKITE OF SrZrO<sub>3</sub> CUBIC PHASE AT 0, 40 AND 100 GPa** as **Poster** modality, in the A9. *Structural and Chemical Characterization of Metals and Alloys* Symposium at the **XXIX International Materials Research Congress** held in Cancun, Mexico from August 15th to 20th, 2021.

Sincerely,

**Patricia del Carmen Zambrano Robledo**  
*President*





**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

## RECONOCIMIENTO

a  
**Leonardo López Ortega**

Por la presentación del trabajo “Estudio de las propiedades ópticas del BaZrO<sub>3</sub> a primeros principios”, cuya autoría se comparte con: *M. Arteaga Varela, Ariadna Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, E. Salinas Rodríguez y V. Rodríguez Lugo*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **V Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
**Director del ICBI**

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
**Líder del Cuerpo Académico de Materiales Avanzados**

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
**Jefe de AACTyM**



**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

## RECONOCIMIENTO

a  
**Juan Pablo Sánchez Anaya**

Por la presentación del trabajo “Comportamiento estructural y electrónico de la **perovskita ferrita de bismuto: un estudio a primeros principios.**”, cuya autoría se comparte con: *M. Arteaga Varela, J. A. García Melo, E. Salinas Rodríguez, A. Sánchez Castillo, V. Rodríguez Lugo*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **V Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
**Director del ICBI**

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
**Líder del Cuerpo Académico de Materiales Avanzados**

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
**Jefe de AACTyM**



**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

## RECONOCIMIENTO

### a Brandon Pedroza Rojas

Por la presentación del trabajo “Estudio a primeros principios del niobato de sodio en sistemas homogéneos”, cuya autoría se comparte con: *M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama, E. Salinas Rodríguez y V. Rodríguez Lugo*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **V Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del ICBI

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de AACTyM



**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

## RECONOCIMIENTO

### a Brayan Oswaldo Sosa Rosas

Por la presentación del trabajo “Estudio a primeros principios de la perovskita Ferrita de Gadolinio y de sus propiedades estructurales, electrónicas y ópticas”, cuya autoría se comparte con: *M. Arteaga Varela, M. A. Camacho González, A. de J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **V Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

Atentamente

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del ICBI

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de AACTyM



**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

## RECONOCIMIENTO

a  
**Brayann Aldair Gutiérrez García**

Por la presentación del trabajo “Determinación de la parte imaginaria de la función dieléctrica en la pervoskita de  $BaTiO_3$ ”, cuya autoría se comparte con: *M. Arteaga varela, M. I. Reyes Valderrama, A. Sánchez Castillo, E. Salinas Rodríguez y V. Rodríguez Lugo*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **V Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
**Director del ICBI**

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
**Líder del Cuerpo Académico de Materiales Avanzados**

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
**Jefe de AACTyM**



**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

## RECONOCIMIENTO

a  
**Eduardo Daniel Rubio Lázaro**

Por la presentación del trabajo “Cálculos ab initio de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del rutenato de estroncio tipo perovskita”, cuya autoría se comparte con: *M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, A. RamírezGarcía, E. Salinas Rodríguez y V. Rodríguez Lugo*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el V **Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
**Director del ICBI**

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
**Líder del Cuerpo Académico de Materiales Avanzados**

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
**Jefe de AACTyM**



**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

## RECONOCIMIENTO

a  
**Gerardo Martínez Orea**

Por la presentación del trabajo “Determinación de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas de la perovskita Manganato de Estroncio a primeros principios”, cuya autoría se comparte con: *M. Arteaga Varela, M. A. Camacho Gonzalez, A. de J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama, A. Sánchez Castillo y V. Rodríguez Lugo*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **V Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
**Director del ICBI**

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
**Líder del Cuerpo Académico de Materiales Avanzados**

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
**Jefe de AACTyM**



**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

## RECONOCIMIENTO

a  
**Gustavo Sánchez López**

Por la presentación del trabajo “Optimización estructural de CsSnBr<sub>3</sub>, mediante AB initio.”, cuya autoría se comparte con: *M. Arteaga Varela, M. A. Camacho González, Ariadna Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo.*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **V Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
**Director del ICBI**

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
**Líder del Cuerpo Académico de Materiales Avanzados**

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
**Jefe de AACTyM**



**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

## RECONOCIMIENTO

a

### Miguel Arteaga Varela

Por la presentación del trabajo “Estudio teórico de las propiedades electrónicas y ópticas en nanoalambres de SrZrO<sub>3</sub> crecidos en las direcciones cristalográficas [001] y [110]”, cuya autoría se comparte con: *A. de J. Herrera Carbajal, E. Salinas Rodríguez, M. I. Reyes Valderrama, Ariadna Sánchez-Castillo y V. Rodríguez Lugo*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **V Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del ICBI

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de AACTyM



**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

## RECONOCIMIENTO

### a Paola Susana Perrusquía Torres

Por la presentación del trabajo “Estudio teórico de las propiedades estructurales, ópticas y electrónicas de una perovskita  $TiMnO_3$  realizado a primeros principios”, cuya autoría se comparte con: *M. Arteaga Varela, J. Serrano Pérez, N. Y. Martínez Palma, A. de J. Herrera Carbajal, E. Salinas Rodríguez y V. Rodríguez Lugo*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **V Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

Atentamente

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del ICBI

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de AACTyM



**TEMÁTICA:** LOS MATERIALES AVANZADOS Y SU IMPACTO EN LA GENERACIÓN DEL CONOCIMIENTO



Otorgan el presente

# RECONOCIMIENTO

a  
**Rommel Flores Cruz**

Por la presentación del trabajo “Cálculo de propiedades electrónicas y estructurales del Silicio y Germanio en bulto mediante la teoría del funcional de densidad (DFT)”, cuya autoría se comparte con: *M. Arteaga Varela, A. de J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama, y V. Rodríguez Lugo*, misma que se efectuó de manera virtual, durante el V **Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 6 al 8 de octubre de 2021.

Mineral de la Reforma, Hgo., 6 de octubre de 2021.

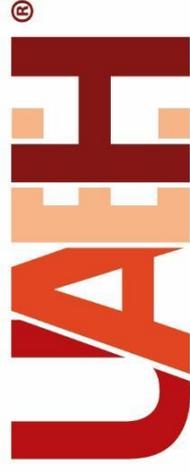
Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
**Director del ICBI**

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
**Líder del Cuerpo Académico de Materiales Avanzados**

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
**Jefe de AACTyM**



Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

otorga el presente

## RECONOCIMIENTO

a

### Miguel Arteaga Varela

Por su participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo “Estudio de las propiedades estructurales y electrónicas de la perovskita  $TiMnO_3$ ” en el marco de actividades del Primer Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales, compartiendo autoría con “P.S. Perrusquía Torres, A. Sánchez Castillo, A. de J. Herrera Carbajal, M.I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo”, efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 16 y 17 de mayo de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 17 de mayo de 2022.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

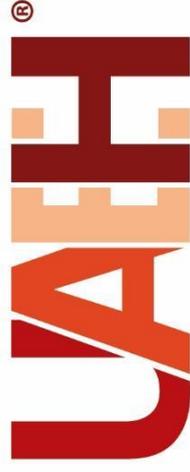
Dr. Otilio Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de  
Ciencias Básicas e  
Ingeniería

Dr. Félix Sánchez de Jesús  
Jefe del Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y  
Materiales

M. en C. Carlos Alfredo  
Zamora Valencia  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil UAEH - SMMater

Dra. Patricia del Carmen  
Zambrano Robledo  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

otorga el presente

## RECONOCIMIENTO

a

### Miguel Arteaga Varela

Por su participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo “Estudio teórico del sistema rutenato de estroncio mediante primeros principios” en el marco de actividades del Primer Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales, compartiendo autoría con “E.D. Rubio Lázaro, A. Sánchez Castillo, S. I. Garduño Vértiz, M.I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo”, efectuado de manera virtual y organizado por el

Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 16 y 17 de mayo de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 17 de mayo de 2022.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

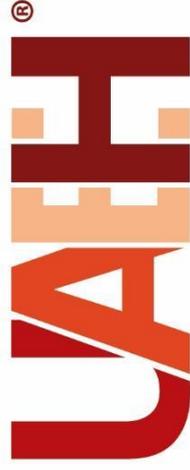
Dr. Otilio Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de  
Ciencias Básicas e  
Ingeniería

Dr. Félix Sánchez de Jesús  
Jefe del Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y  
Materiales

M. en C. Carlos Alfredo  
Zamora Valencia  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil UAEH - SMMater

Dra. Patricia del Carmen  
Zambrano Robledo  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

otorga el presente

## RECONOCIMIENTO

a

### Miguel Arteaga Varela

Por su participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo “Cálculo de las propiedades estructurales, electrónicas y ópticas del sistema CsSnBr<sub>3</sub>” en el marco de actividades del Primer Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales, compartiendo autoría con “G. Sánchez López, A, Sánchez Castillo, S. I. Garduño Vértiz, M.I. Reyes Valderrama, V. Rodríguez Lugo”, efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 16 y 17 de mayo de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 17 de mayo de 2022.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

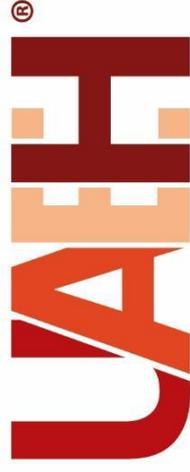
Dr. Otilio Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de  
Ciencias Básicas e  
Ingeniería

Dr. Félix Sánchez de Jesús  
Jefe del Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y  
Materiales

M. en C. Carlos Alfredo  
Zamora Valencia  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil UAEH - SMMater

Dra. Patricia del Carmen  
Zambrano Robledo  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

otorga el presente

## RECONOCIMIENTO

a

### Miguel Arteaga Varela

Por su participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo “Estudio de las propiedades electrónicas en un nanolambre de SrZrO<sub>3</sub> crecido en la dirección cristalográfica [100] y [110]” en el marco de actividades del Primer Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales, compartiendo autoría con “M.I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal, Ariadna Sánchez Castillo, V. Rodríguez Lugo”, efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 16 y 17 de mayo de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 17 de mayo de 2022.

Dr. Otilio Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de  
Ciencias Básicas e  
Ingeniería

Atentamente

Dr. Félix Sánchez de Jesús  
Jefe del Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y  
Materiales

M. en C. Carlos Alfredo  
Zamora Valencia  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil UAEH - SMMater

Dra. Patricia del Carmen  
Zambrano Robledo  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





August 2022

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Brayan Javier Lorenzano Hernández, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Miguel Arteaga Varela, María Isabel Reyes Valderrama, Otilio Arturo Acevedo Sandoval, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **THEORETICAL STUDY OF THE OPTICAL AND ELECTRONIC PROPERTIES OF PEROVSKITE SrTiO<sub>3</sub> IN CUBIC PHASE** as **Poster** modality, in the *D7. Structural and Chemical Characterization of Metals and Alloys* Symposium at the **XXX International Materials Research Congress and International Conference on Advanced Materials** held in Cancun, Mexico from August 14th to 19th, 2022.

Sincerely,

**Patricia del Carmen Zambrano Robledo**  
*President*





August 2022

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Gustavo Sánchez López, Ariadna Sanchez Castillo, Salvador Ivan Garduño, María Isabel Reyes Valderrama, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **THEORETICAL STUDY OF THE  $\text{CSSNBR}_3$  PEROVSKITE AND THE DETERMINATION OF ITS STRUCTURAL, ELECTRONIC, AND OPTICAL PROPERTIES** as **Poster** modality, in the *D7. Structural and Chemical Characterization of Metals and Alloys* Symposium at the **XXX International Materials Research Congress and International Conference on Advanced Materials** held in Cancun, Mexico from August 14th to 19th, 2022.

Sincerely,

**Patricia del Carmen Zambrano Robledo**  
*President*





August 2022

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Paola Susana Perrusquía Torres, María Isabel Reyes Valderrama, Salvador Ivan Garduño, Ariadna Sanchez Castillo, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **STUDY OF THE STRUCTURAL, OPTICAL, AND ELECTRONIC PROPERTIES OF A  $\text{TiMnO}_3$  PEROVSKITE BY FIRST PRINCIPLES** as **Poster** modality, in the *D7. Structural and Chemical Characterization of Metals and Alloys* Symposium at the **XXX International Materials Research Congress and International Conference on Advanced Materials** held in Cancun, Mexico from August 14th to 19th, 2022.

Sincerely,

**Patricia del Carmen Zambrano Robledo**  
*President*



August 2022

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Gerardo Martínez Orea, Ariadna Sanchez Castillo, María Isabel Reyes Valderrama, Salvador Ivan Garduño, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **DETERMINATION OF THE STRUCTURAL, ELECTRONIC, AND OPTICAL PROPERTIES OF THE STRONTIUM MANGANATE PEROVSKITE AT FIRST PRINCIPLES** as **Poster** modality, in the *D7. Structural and Chemical Characterization of Metals and Alloys* Symposium at the **XXX International Materials Research Congress and International Conference on Advanced Materials** held in Cancun, Mexico from August 14th to 19th, 2022.

Sincerely,

**Patricia del Carmen Zambrano Robledo**  
*President*





August 2022

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Brayan Oswaldo Sosa Rosas, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, María Isabel Reyes Valderrama, Ventura Rodríguez Lugo* presented the contribution: **THEORY STUDY OF STRUCTURAL, ELECTRONIC AND OPTICAL PROPERTIES IN THE PEROVSKITE  $\text{GDFEO}_3$**  as **Poster** modality, in the *D7. Structural and Chemical Characterization of Metals and Alloys Symposium* at the **XXX International Materials Research Congress and International Conference on Advanced Materials** held in Cancun, Mexico from August 14th to 19th, 2022.

Sincerely,

**Patricia del Carmen Zambrano Robledo**  
*President*





August 2022

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ariadna Sanchez Castillo, Otilio Arturo Acevedo Sandoval, María Isabel Reyes Valderrama, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **NANOWIRE OPTIMIZATION OF STRONTIUM ZIRCONATE (SRZRO<sub>3</sub>) TYPE PEROVSKITE: A THEORETICAL STUDY OF THE FIRST PRINCIPLES** as **Poster** modality, in the *D7. Structural and Chemical Characterization of Metals and Alloys* Symposium at the **XXX International Materials Research Congress and International Conference on Advanced Materials** held in Cancun, Mexico from August 14th to 19th, 2022.

Sincerely,

**Patricia del Carmen Zambrano Robledo**  
*President*



August 2022

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Rommel Flores Cruz, Miguel Arteaga Varela, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, María Isabel Reyes Valderrama, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **FIRST-PRINCIPLES CALCULATIONS OF THE STRUCTURAL PROPERTIES AND ELECTRONICS OF THE SILICON AND GERMANIUM IN BULK** as **Poster** modality, in the *D7. Structural and Chemical Characterization of Metals and Alloys* Symposium at the **XXX International Materials Research Congress and International Conference on Advanced Materials** held in Cancun, Mexico from August 14th to 19th, 2022.

Sincerely,

**Patricia del Carmen Zambrano Robledo**  
*President*



**Seminario Regional  
de Materiales Avanzados**  
"Los materiales a través de las fronteras"  
5 al 7 de octubre 2022



otorgan el presente

# Reconocimiento

## a

### Miguel Arteaga Varela

Por la presentación en póster de manera oral "Estudio teórico de la perovskita  $\text{TiMnO}_3$  empleando primeros principios", cuya autoría se comparte con: P. S. Perrusquia Torres, A. Sánchez Castillo, A. J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo, misma que se efectuó de manera virtual, durante el VI Seminario Regional de Materiales Avanzados, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 5 al 7 de octubre de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 7 de octubre de 2022.

Atentamente  
"Amor, Orden y Progreso"

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de Ciencias  
Básicas e Ingeniería

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y Materiales



**Seminario Regional  
de Materiales Avanzados**  
"Los materiales a través de las fronteras"  
5 al 7 de octubre 2022



otorgan el presente

# Reconocimiento

## a Miguel Arteaga Varela

Por la presentación en póster de manera oral "Cálculos a primeros principios del rutenato de estroncio mediante el código siesta", cuya autoría se comparte con: E. D. Rubio Lázaro, A. Sánchez Castillo, S. I. Garduño Vértiz, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo, misma que se efectuó de manera virtual, durante el VI Seminario Regional de Materiales Avanzados, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 5 al 7 de octubre de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 7 de octubre de 2022.

Atentamente  
"Amor, Orden y Progreso"

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de Ciencias  
Básicas e Ingeniería

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y Materiales



**Seminario Regional  
de Materiales Avanzados**  
"Los materiales a través de las fronteras"  
5 al 7 de octubre 2022



otorgan el presente

# Reconocimiento

## a

### Miguel Arteaga Varela

Por la presentación en póster de manera oral "Estudio a primeros principios de las propiedades del sistema CsSnBr<sub>3</sub>", cuya autoría se comparte con: G. Sánchez López, A. Sánchez Castillo, S. I. Garduño Vértiz, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo, misma que se efectuó de manera virtual, durante el VI Seminario Regional de Materiales Avanzados, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 5 al 7 de octubre de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 7 de octubre de 2022.

Atentamente

"Amor, Orden y Progreso"

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de Ciencias  
Básicas e Ingeniería

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y Materiales



**Seminario Regional  
de Materiales Avanzados**  
"Los materiales a través de las fronteras"  
5 al 7 de octubre 2022



otorgan el presente

# Reconocimiento

## a

### Miguel Arteaga Varela

Por la presentación en póster de manera oral "Estudio a primeros principios en nanoalambres de SrZrO<sub>3</sub> crecido en la dirección cristalográficas [100] y [110]", cuya autoría se comparte con: A. Sánchez Castillo, A. J. Herrera Carbajal, M. I. Reyes Valderrama y V. Rodríguez Lugo, misma que se efectuó de manera virtual, durante el VI Seminario Regional de Materiales Avanzados, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 5 al 7 de octubre de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 7 de octubre de 2022.

Atentamente

"Amor, Orden y Progreso"

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de Ciencias  
Básicas e Ingeniería

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y Materiales



La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

otorga el presente

## RECONOCIMIENTO

a

### Miguel Arteaga Varela

Por su destacada participación en el concurso de carteles científicos presentando el trabajo titulado “Estudio de las propiedades estructurales de sistemas unidimensionales de  $\text{SrZrO}_3$  empleando la teoría del funcional de la densidad” dentro del marco de actividades del Segundo Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales, compartiendo autoría con “Ariadna Sánchez Castillo, María Isabel Reyes Valderrama, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal y Ventura Rodríguez Lugo”, efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 20 y 21 de abril de 2023.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 21 de abril de 2023.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”



Dr. Otilio Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de  
Ciencias Básicas e  
Ingeniería



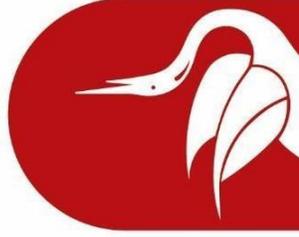
Dr. Félix Sánchez de Jesús  
Jefe del Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y  
Materiales



Ing. Brayan Javier  
Lorenzano Hernández  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil UAEH - SMMater



Dr. Jesús González  
Hernández  
Presidente de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





August 2023

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Florelli Acsabely Hernández Rubio, Miguel Arteaga Varela, Ariadna Sanchez Castillo, José de Jesús Pelayo Cárdenas, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **AB-INITIO CALCULATIONS OF BIMETALLIC CdAg AND ZnCu [001] ALLOYS NANOWIRES** as **Poster** modality, in the *E3. Structural Chemical Characterization of Metal Alloys* Symposium at the **31st International Materials Research Congress** held in Cancun, Mexico from August 13th to 18th, 2023.

Sincerely,

**Jesús González Hernández**  
*President*





August 2023

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Ariadna Sanchez Castillo, María Isabel Reyes Valderrama, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **STUDY OF THE STRUCTURAL PROPERTIES OF UNIDIMENSIONAL SYSTEMS OF SrZrO<sub>3</sub> USING THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY.** as **Poster** modality, in the *E3. Structural Chemical Characterization of Metal Alloys* Symposium at the **31st International Materials Research Congress** held in Cancun, Mexico from August 13th to 18th, 2023.

Sincerely,

**Jesús González Hernández**  
*President*





August 2023

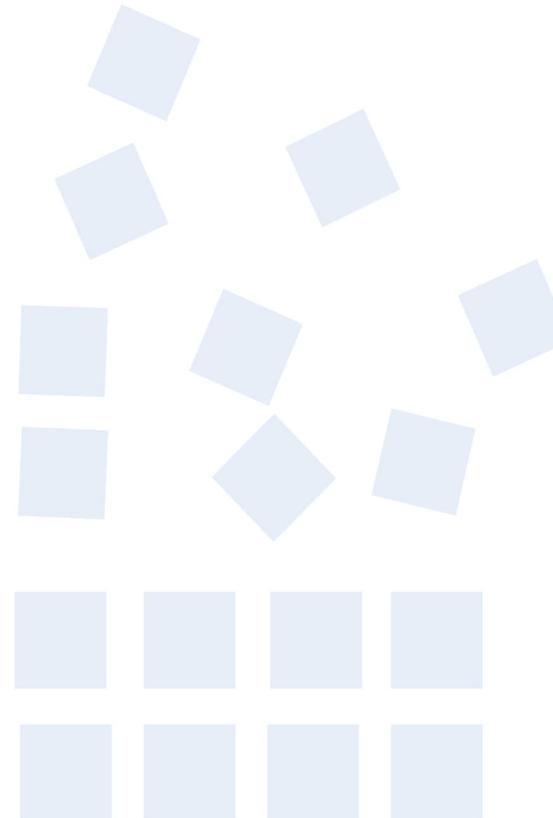
**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Ariadna Sanchez Castillo, María Isabel Reyes Valderrama, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **THEORETICAL STUDY OF THE PROPERTIES OF THE CsSnBr<sub>3</sub> SYSTEM; USING FIRST PRINCIPLES.** as **Poster** modality, in the *E3. Structural Chemical Characterization of Metal Alloys* Symposium at the **31st International Materials Research Congress** held in Cancun, Mexico from August 13th to 18th, 2023.

Sincerely,

**Jesús González Hernández**  
*President*



Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales, A.C., awards the present

# CERTIFICATE TO:

Miguel Arteaga Varela, Ariadna Sánchez Castillo, María Isabel Reyes Valderrama, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodríguez Lugo

For the participation in the XVI International Conference on Surfaces, Materials and Vacuum, with the poster:

**318-THEORETICAL STUDY OF THE RELATIONSHIP BETWEEN THE STRUCTURE AND THE ELECTRONIC PROPERTIES OF SrZrO<sub>3</sub> NANOWIRES USING DFT**

The present certificate is issued on September 29th, 2023.



Sociedad Mexicana de Ciencia y Tecnología de Superficies y Materiales A.C.

Cristóbal Manuel Yee Rendón  
President SMCTSM

otorgan el presente

# Reconocimiento

a

## Miguel Arteaga Varela

Por la presentación en póster de manera oral “**Estudio de las propiedades estructurales en nanoalambres de metales con memoria de forma**” cuya autoría se comparte con: M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal y V. Rodríguez Lugo, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **VII Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 23 de octubre de 2023.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”



Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de Ciencias  
Básicas e Ingeniería

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y Materiales



otorgan el presente

# Reconocimiento

a

## Miguel Arteaga Varela

Por la presentación en póster de manera oral “**Cálculos a primeros principios del sistema GeO<sub>2</sub> en bulto empleando DFT**” cuya autoría se comparte con: M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal y V. Rodríguez Lugo, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **VII Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 23 de octubre de 2023.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”



Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de Ciencias  
Básicas e Ingeniería



Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados



Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y Materiales



otorgan el presente

# Reconocimiento

a

## Miguel Arteaga Varela

Por la presentación en póster de manera oral “**Cálculos a primeros principios del sistema GeO<sub>2</sub> en bulto empleando DFT**” cuya autoría se comparte con: M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal y V. Rodríguez Lugo, misma que se efectuó de manera virtual, durante el **VII Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 23 de octubre de 2023.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”



Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de Ciencias  
Básicas e Ingeniería



Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados



Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y Materiales



La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

otorga el presente

## Reconocimiento

a

# Miguel Arteaga Varela

Por su destacada participación en el concurso de Cartel científico presentando el trabajo titulado “Determinación del coeficiente de poisson en nanoalambres bimetálicos” dentro del marco de actividades del Tercer Congreso Estatal de Investigación en Ciencias de los Materiales, compartiendo autoría con “M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, M. I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal, V. Rodríguez Lugo” efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil Hidalgo-SMMater, durante los días de 25 y 26 de abril de 2024.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 08 de mayo 2024.

Atentamente

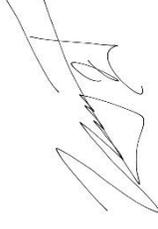
“Amor, Orden y Progreso”



Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de  
Ciencias Básicas e  
Ingeniería



Dr. Julio Cesar Juárez Tapia  
Jefe del Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y  
Materiales



Víctor Javier Garrido Hernández  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil UAEH-SMMater



Dr. Juan Manuel Mora Hernández  
Coordinador de los Capítulos  
Estudiantiles de la Sociedad  
Mexicana de Materiales

La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

otorga el presente

## Reconocimiento

a

# Miguel Arteaga Varela

Por su destacada participación en el concurso de Cartel científico presentando el trabajo titulado “Estudio teórico del comportamiento electrónico respecto a las propiedades estructurales en nanoalambres de zirconato de estroncio” dentro del marco de actividades del Tercer Congreso Estatal de Investigación en Ciencias de los Materiales, compartiendo autoría con “M. Arteaga Varela, A. Sánchez Castillo, Ma. I. Reyes Valderrama, A. de J. Herrera Carbajal, V. Rodríguez Lugo” efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil Hidalgo-SMMater, durante los días de 25 y 26 de abril de 2024.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 08 de mayo 2024.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”



Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de  
Ciencias Básicas e  
Ingeniería



Dr. Julio Cesar Juárez Tapia  
Jefe del Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y  
Materiales



Víctor Javier Garrido Hernández  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil UAEH-SMMater



Dr. Juan Manuel Mora Hernández  
Coordinador de los Capítulos  
Estudiantiles de la Sociedad  
Mexicana de Materiales



August 2024

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Lesly Sabina Villaseñor Cerón, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **2D GOLD NANOSTRUCTURE STUDY USING FIRST-PRINCIPLES METHODS** as **Poster** modality, in the *D4. New Trends in Nanoscience and Nanotechnology: Innovative Synthesis, Novel Properties, Theory and Challenges* Symposium at the **32nd International Materials Research Congress** held in Cancun, Mexico from August 18th to 23th, 2024.

Sincerely,

**Jesús González Hernández**  
*President*





August 2024

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Rommel Flores Cruz, Miguel Arteaga Varela, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **DESIGN AND DETERMINATION OF THE STRUCTURAL AND MECHANICAL PROPERTIES OF TWO DIMENSIONAL GERMANIUM, BORON AND SILICON SYSTEMS USING THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY** as **Poster** modality, in the *C3. Materials Science & Quantum Technology* Symposium at the **32nd International Materials Research Congress** held in Cancun, Mexico from August 18th to 23th, 2024.

Sincerely,

**Jesús González Hernández**  
*President*





August 2024

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Ariadna Sanchez Castillo, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **THEORETICAL STUDY OF MECHANICAL PROPERTIES IN BIMETALLIC ZrRh AND ZrCu NANOWIRES WITH GROWTH DIRECTIONS [110] AND [111]**. as **Poster** modality, in the *C3. Materials Science & Quantum Technology* Symposium at the **32nd International Materials Research Congress** held in Cancun, Mexico from August 18th to 23th, 2024.

Sincerely,

**Jesús González Hernández**  
*President*





August 2024

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Ariadna Sanchez Castillo, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **THEORETICAL STUDY OF MECHANICAL PROPERTIES IN BIMETALLIC ZrRh AND ZrCu NANOWIRES WITH GROWTH DIRECTIONS [110] AND [111]**. as **Poster** modality, in the *C3. Materials Science & Quantum Technology* Symposium at the **32nd International Materials Research Congress** held in Cancun, Mexico from August 18th to 23th, 2024.

Sincerely,

**Jesús González Hernández**  
*President*





August 2024

**TO WHOM IT MAY CONCERN**

P r e s e n t

This is to certify that *Miguel Arteaga Varela, Ariadna Sanchez Castillo, Alejandro de Jesús Herrera Carbajal, Ventura Rodriguez Lugo* presented the contribution: **THEORETICAL STUDY OF THE ELECTRONIC BEHAVIOR IN 1D SYSTEMS OF SrZrO<sub>3</sub> INFLUENCED BY STRUCTURAL PROPERTIES** as **Poster** modality, in the *C3. Materials Science & Quantum Technology* Symposium at the **32nd International Materials Research Congress** held in Cancun, Mexico from August 18th to 23th, 2024.

Sincerely,

**Jesús González Hernández**  
*President*





## La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

Otorga

### Mención Honorífica

a

### Miguel Arteaga Varela

En atención al desempeño académico y trabajo de investigación que presentó para la obtención del grado de **Maestro en Ciencias de los Materiales** que sustentó el día siete de enero de dos mil veintiuno.

**"Amor, Orden y Progreso"**

Expedida en la ciudad de Pachuca de Soto, Hidalgo, el 8 de marzo de 2021

M. en D. **Adolfo Pomarigo Loyola**  
Rector

Mtro. **Guillermo Edgar Rabling Conde**  
Director del Colegio de Posgrado

# 2021 Park Nano Academy

## Lectures and Live Demos

# CERTIFICADO DE CURSO

Expede el presente certificado de terminación de curso virtual a:

*Mtra. en E. Miguel Arteaga Varela*

Pioneros de lo Nano

Por completar satisfactoriamente con 94.29 en su evaluación del curso:  
**Teórico - práctico en Microscopía de Fuerza Atómica**  
**Modos Pint Point™ Nanomecánicos, Microscopía de Fuerza-Modulación,**  
**Nanomanipulación, Nanoindentación y Nanolitografía.**  
**Duración 12 horas. Del 25 al 27 de Enero, 2021.**



---

**Byong Kim**  
Technical Services Senior Director  
Park Systems



---

**Armando Melgarejo**  
Technical Services Engineer  
Park Systems



Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

**DIVISIÓN ACADÉMICA  
DIRECCIÓN DE SUPERACIÓN ACADÉMICA**

EXTIENDE LA PRESENTE

**CONSTANCIA**

A

**Miguel Arteaga Varela**

POR HABER ACREDITADO SATISFACTORIAMENTE EL

**"Diplomado en Formación Didáctico Pedagógica"**

Del programa de Convocatoria al concurso de oposición para ocupar plazas por asignatura de la UAEH con una duración de 120 horas, durante el periodo del 24 de Octubre de 2022 al 30 de Noviembre de 2022.

**"AMOR, ORDEN Y PROGRESO"**

Pachuca, Hgo., Noviembre de 2022

Dr. Orlando Ávila Pozos  
Coordinador de la División Académica

Mtro. Fernando Gutiérrez Ascencio  
Director de Superación Académica





Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

otorga el presente

## RECONOCIMIENTO

al

### M. en C. Miguel Arteaga Varela

Por su participación en la organización como Asesor del Primer Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 16 y 17 de mayo de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 17 de mayo de 2022.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de  
Ciencias Básicas e  
Ingeniería

Dr. Félix Sánchez de Jesús  
Jefe del Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y  
Materiales

M. en C. Carlos Alfredo  
Zamora Valencia  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil UAEH - SMMater

Dra. Patricia del Carmen  
Zambrano Robledo  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo

La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

otorga el presente

## RECONOCIMIENTO

al

### M. en C. Miguel Arteaga Varela

Por su participación en la organización como Asesor del Primer Congreso Estatal de investigación en Ciencias de los Materiales efectuado de manera virtual y organizado por el Capítulo Estudiantil UAEH – SMMater durante los días 16 y 17 de mayo de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 17 de mayo de 2022.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”

Dr. Otilio Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de  
Ciencias Básicas e  
Ingeniería

Dr. Félix Sánchez de Jesús  
Jefe del Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y  
Materiales

M. en C. Carlos Alfredo  
Zamora Valencia  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil UAEH - SMMater

Dra. Patricia del Carmen  
Zambrano Robledo  
Presidenta de la Sociedad  
Mexicana de Materiales





otorgan el presente

# Reconocimiento

al

## M. en C. Miguel Arteaga Varela

Por su participación como organizador, en las actividades realizadas durante el VI Seminario Regional de Materiales Avanzados, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales del 5 al 7 de octubre de 2022.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 7 de octubre de 2022.

Atentamente  
"Amor, Orden y Progreso"

Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de Ciencias  
Básicas e Ingeniería

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Lider del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados

Dr. Félix Sánchez De Jesús  
Jefe de Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y Materiales



otorgan el presente

# Reconocimiento

al

## M. en C. Miguel Arteaga Varela

Por su participación como organizador, en las actividades realizadas durante el **VII Seminario Regional de Materiales Avanzados**, organizado por el Cuerpo Académico de Materiales Avanzados perteneciente al Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 23 de octubre de 2023.

Atentamente  
“Amor, Orden y Progreso”



Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
**Director del Instituto de Ciencias  
Básicas e Ingeniería**

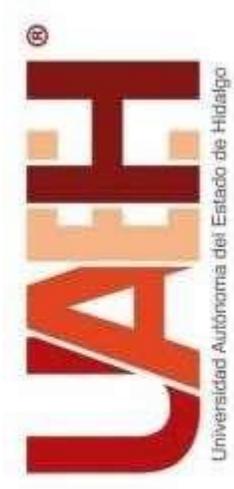


Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
**Líder del Cuerpo Académico de  
Materiales Avanzados**



Dr. Félix Sánchez De Jesús  
**Jefe de Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y Materiales**





La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería otorga el presente

## RECONOCIMIENTO

a

**Miguel Arteaga Varela**

*Por su participación como Revisor en 1 manuscrito de Pádi Boletín Científico de Ciencias Básicas e Ingenierías del ICBI (ISSN: 2007-6363) del Vol. 11 No. Especial 5 (2023), durante el periodo Junio-Diciembre de 2023.*

Mineral de la Reforma, Hgo., a 13 de diciembre de 2023.

Atentamente  
“Amor, Orden y Progreso”



Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del ICBI

Dr. Raúl Villafuerte Segura  
Editor en Jefe de Pádi



Número de control: ICBI-D/R/1833/2023



otorgan el presente

## Reconocimiento

al

# M. en C. Miguel Arteaga Varela

Por su participación como organizador durante el VIII Seminario Regional de Materiales Avanzados, que se llevó a cabo del 1 al 4 de octubre de 2024, organizado por el Área Académica de Ciencias de la Tierra y Materiales.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 4 de octubre de 2024.

Atentamente  
“Amor, Orden y Progreso”

Mtro. Gabriel Vergara  
Rodríguez  
Director del ICBI

Dr. Julio Cesar Juárez Tapia  
Jefe de Área Académica de Ciencias de  
la Tierra y Materiales

Dr. Ventura Rodríguez Lugo  
Líder del Cuerpo Académico  
de Materiales Avanzados y  
Organizador principal del  
Seminario Regional de  
Materiales Avanzados



**VIII**  
SEMINARIO  
REGIONAL DE  
MATERIALES  
AVANZADOS

La ciencia de los materiales en la evolución tecnológica



La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería otorga el presente

## RECONOCIMIENTO

a

**Miguel Arteaga Varela**

Por su participación como Revisor de (1) manuscrito de Pádi Boletín Científico de Ciencias Básicas e Ingenierías del ICBI (ISSN: 2007-6363) del Vol. 11 No. 21 (2023), durante el periodo Enero-Junio de 2023.

Mineral de la Reforma, Hgo., a 13 de julio de 2023.

Atentamente

“Amor, Orden y Progreso”



Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del ICBI



Dr. Raúl Villafuerte Segura  
Editor en Jefe de Pádi

La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo a través del Instituto de Ciencias Básicas e Ingeniería

otorga el presente

## Reconocimiento

a

# Miguel Artega Varela

Por su destacada participación como organizador del Tercer Congreso Estatal de Investigación en Ciencias de los Materiales, efectuado de manera presencial y organizado por el Capítulo Estudiantil Hidalgo-SMMater, durante los días de 25 y 26 de abril de 2024.

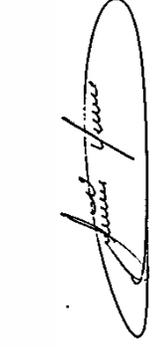
Mineral de la Reforma, Hgo., a 08 de mayo de 2024.

Atentamente

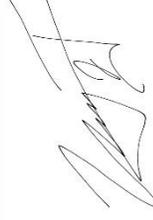
“Amor, Orden y Progreso”



Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval  
Director del Instituto de  
Ciencias Básicas e  
Ingeniería



Dr. Julio Cesar Juárez Tapia  
Jefe del Área Académica de  
Ciencias de la Tierra y  
Materiales



Víctor Javier Garrido Hernández  
Presidente del Capítulo  
Estudiantil UAEH-SMMater



Dr. Juan Manuel Mora Hernández  
Coordinador de Capítulos  
Estudiantiles de la Sociedad  
Mexicana de Materiales



Mineral de la Reforma, Hgo. a 08 de mayo de 2024

**Numero de control:** ICBI-AACTyM/786/2024

**Asunto:** Constancia de participación en el Capítulo Estudiantil HIDALGO-SMMater 2024

**A QUIEN CORRESPONDA**

Por este medio se hace constar que **Arteaga Varela Miguel**, asistió al **Curso de Caracterización de nanomateriales por microscopía electronica de transmisión** Centro de Física y Tecnología Avanzada CFATA, dentro del marco de actividades del Tercer Congreso Estatal de Investigación en Ciencias de los Materiales organizado por el Capítulo Estudiantil HIDALGO-SMMater de manera presencial y con una duración de 3 horas.

Se extiende la presente constancia para los fines y efectos a los que haya lugar.

Atentamente

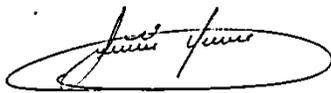
“Amor, Orden y Progreso”



**Ing. Víctor Javier Garrido Hernández**  
Presidente del Capítulo Estudiantil  
HIDALGO-SMMater



**Dr. Juan Manuel Mora Hernández**  
Coordinador de Capítulos Estudiantiles de  
la Sociedad Mexicana de Materiales



**Dr. Julio César Juárez Tapia**  
Jefe del Área Académica de Ciencias de la  
Tierra y Materiales



**Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval**  
Director del Instituto de Ciencias Básicas e  
Ingeniería

Ciudad del Conocimiento, Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5 Colonia Carboneras, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México. C.P. 42184  
Teléfono: 52 (771) 71 720 00 Ext. 2270, 2280  
Fax 2109  
aactym\_icbi@uaeh.edu.mx

Mineral de la Reforma, Hgo. a 08 de mayo de 2024

**Numero de control:** ICBI-AACTyM/904/2024

**Asunto:** Constancia de participación en el Capítulo Estudiantil HIDALGO-SMMater 2024

**A QUIEN CORRESPONDA**

Por este medio se hace constar que **Arteaga Varela Miguel**, asistió al **Curso Introducción a la microscopía electrónica de barrido y microanálisis EDS**. Impartido el 25 de abril por el M. en C. Martin Palacios Dorado, Gerente de Aplicaciones de JEOL de México, dentro del marco de actividades del Tercer Congreso Estatal de Investigación en Ciencias de los Materiales organizado por el Capítulo Estudiantil HIDALGO-SMMater de manera presencial y con una duración de 3 horas.

Se extiende la presente constancia para los fines y efectos a los que haya lugar.

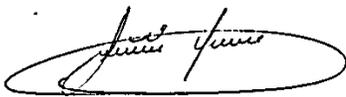
Atentamente  
“Amor, Orden y Progreso”



**Ing. Víctor Javier Garrido Hernández**  
Presidente del Capítulo Estudiantil  
HIDALGO-SMMater



**Dr. Juan Manuel Mora Hernández**  
Coordinador de Capítulos Estudiantiles de  
la Sociedad Mexicana de Materiales



**Dr. Julio César Juárez Tapia**  
Jefe del Área Académica de Ciencias de la  
Tierra y Materiales



**Dr. Otilio Arturo Acevedo Sandoval**  
Director del Instituto de Ciencias Básicas e  
Ingeniería

Ciudad del Conocimiento, Carretera Pachuca-Tulancingo Km. 4.5 Colonia Carboneras, Mineral de la Reforma, Hidalgo, México. C.P. 42184  
Teléfono: 52 (771) 71 720 00 Ext. 2270, 2280  
Fax 2109  
aactym\_icbi@uaeh.edu.mx