



UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN EN ENERGÍAS
RENOVABLES

TESIS

“SÍNTESIS Y CARACTERIZACIÓN DE
NANOESTRUCTURAS DE β - Ga_2O_3 PARA SU
APLICACIÓN COMO MATERIAL FOTOCATALÍTICO”

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
INGENIERO EN ENERGÍAS RENOVABLES

PRESENTA

ANA LILIA MELCHOR TOVILLA

DIRECTOR

DR. HÉBER VILCHIS BRAVO

ASESOR

MTRO. CÉSAR AUGUSTO CAMAS FLORES

Tuxtla Gutiérrez; Chiapas

octubre del 2021





Tuxtla Gutiérrez, Chiapas
1 de octubre del 2021

C. Ana Lilia Melchor Tovilla

Pasante del Programa Educativo de: Ingeniería en Energías Renovables

Realizado el análisis y revisión correspondiente a su trabajo recepcional denominado:
Síntesis y Caracterización de Nanoestructuras de β -Ga₂O₃ para su Aplicación como Material
Fotocatalítico

En la modalidad de: Tesis profesional

Nos permitimos hacer de su conocimiento que esta Comisión Revisora considera que dicho documento reúne los requisitos y méritos necesarios para que proceda a la impresión correspondiente, y de esta manera se encuentre en condiciones de proceder con el trámite que le permita sustentar su Examen Profesional.

ATENTAMENTE

Revisores

Dr. Gerardo Gutiérrez Heredia

Dr. Roger Castillo Palomera

Dr. Héber Vilchis Bravo

Firmas:

Gerardo Gutiérrez H.

Ccp. Expediente

"La vida no es fácil, para ninguno de nosotros. Pero... ¡Qué importa! Hay que perseverar y, sobre todo, tener confianza en uno mismo. Hay que sentirse dotado para realizar alguna cosa y esa cosa hay que alcanzarla, cueste lo que cueste."

Marie Curie (1867-1934)

AGRADECIMIENTOS

A mi madre Olga Lilia Tovilla Madrigal, por ser mi ejemplo a seguir e impulsarme a lograr todos mis propósitos.

A mi padre Hermelindo Melchor Mota, por su apoyo incondicional y velar siempre por mi bienestar.

A mis hermanas Fernanda Melchor Tovilla y María del Rocío Tovilla Madrigal, por ser mis confidentes y un gran apoyo a lo largo de mi vida.

A mi asesor Dr. Heber Vilchis Bravo, por brindarme la oportunidad de trabajar con él, transmitirme sus conocimientos y la confianza para desarrollar este proyecto de tesis.

Al Mtro. César Augusto Camas Flores, por todo el conocimiento, paciencia y dedicación que me brindó a largo del proyecto.

A Pablo Gilberto Gómez Flores, por su amor y apoyo en los tiempos más difíciles.

A Violeta Rodríguez Toledo y Erik Armando Marina Lara, por su amistad y apoyo como amigos y compañeros.

A Miguel Arnulfo Pérez Flores, Diego López Juárez, César David Camacho Matus y José Carlos Pérez Vásquez, por brindarme su amistad durante estos cuatro años y hacer más amenos los días en las aulas.

A mis amigos y compañeros de grupo, siempre llevaré conmigo una parte de cada uno.

A los docentes y personal de mi alma mater, por todo su apoyo, enseñanzas y cariño que me otorgaron.

A la Fundación Telmex Telcel, por haberme permitido ser becaria.

Resumen

El Óxido de Galio (Ga_2O_3) es un material transparente que pertenece a la familia de óxidos semiconductores. En los últimos años, estas películas han sido de gran interés para usarse como capa activa en varias aplicaciones industriales, incluidos catalizadores, sensores de gas y celdas solares.

En este trabajo se estudian la síntesis y caracterización del Ga_2O_3 para aplicarlo como material fotocatalítico. Las películas delgadas se crecieron mediante el método de oxidación térmica controlada (OTC); se utilizó GaAs como sustrato con orientación en los planos preferenciales (1 0 0) y (1 1 1); los cuales fueron tratados térmicamente con rampas desde 400°C a 880°C . Además, se realizó una modelación del crecimiento de Ga_2O_3 a través de Dinámica Molecular usando el código abierto LAMMPS. Los cálculos fueron elaborados con un rango de 1,000 a 5,000 átomos, las condiciones de temperaturas fueron análogas a las experimentales y los tiempos de ejecución fueron de 1,000 a 2,000 adicionando 50,000 pasos de tiempo para el proceso de enfriamiento posterior al crecimiento.

El objetivo principal de este trabajo es estudiar el Ga_2O_3 como material fotocatalítico ya que presenta diferentes propiedades que son favorables para su desarrollo en dicha aplicación. Una vez obtenidas las películas delgadas, se caracterizaron por Difracción de Rayos X (DRX) y Microscopía Electrónica de Barrido (MEB), posteriormente realizar el proceso de fotodegradación y caracterizar por Espectroscopia de UV-vis.

Como resultados se destaca la obtención de películas nanoestructuradas de Ga_2O_3 monoclinico, se comprobó la actividad fotocatalítica cuando las muestras son expuestas a la luz UV; por otro lado se modeló el proceso de crecimiento de manera computacional.

Abstract

Ga_2O_3 is a transparent material that belongs to the family of semiconductor oxides. In recent years, Ga_2O_3 nanostructured films have been of great interest to be used as an active layer in various industrial applications, including catalysts, gas sensors and solar cells.

In this work, we studied the synthesis and characterization of gallium oxide (Ga_2O_3) to apply it as a photocatalytic material. Ga_2O_3 thin films were grown by the controlled thermal oxidation (CTO) method; GaAs was used as substrates with orientations (1 0 0) and (1 1 1); which were heat treated with ramps from 400°C to 880°C . In addition, a modeling of the growth of Ga_2O_3 was performed through Molecular Dynamics using the open source LAMMPS. The programming codes were made with a range of 1 K to 5 K atoms, the temperature conditions were analogous to the experimental ones and the time steps used were from 1 K to 2 K adding 50 K time steps for the cooling process after the growth.

The main objective of this work was to apply Ga_2O_3 as a photocatalytic material due to it has different properties that are favorable for its development in said application. Once the samples were obtained, they were characterized by X-Ray Diffraction (XRD) and Scanning Electron Microscopy (SEM), to later carry out the photodegradation process and characterized by UV-vis Spectroscopy.

As results, the obtaining of monoclinic Ga_2O_3 nanostructured films stands out, the photocatalytic activity was verify when the samples are exposed to UV light; on the other hand, the growth process was modeled computationally.

ÍNDICE

AGRADECIMIENTOS	5
Resumen.....	6
Abstract	7
CAPÍTULO I INTRODUCCIÓN.....	11
1.1 Introducción.....	11
1.2 Declaración del problema.....	12
1.3 Justificación	13
1.4 Objetivo general.....	13
1.5 Objetivos particulares.....	13
CAPÍTULO II MARCO TEÓRICO	14
2.1 Estado del arte.....	14
2.1 Óxidos Semiconductores Transparentes	16
2.2 Óxido de galio.....	16
2.2.1 Propiedades eléctricas	17
2.2.2 Propiedades estructurales	17
2.2.3 Propiedades ópticas.....	18
2.3 Oxidación térmica controlada.....	20
2.4 Dinámica molecular	20
2.4.1 Potenciales	21
2.4.2 Software.....	21
2.5 Visualizador molecular	22
2.6 Métodos de caracterización	23
2.6.1 Difracción de rayos x (DRX)	23
2.6.2 Ley de Bragg	24
2.6.3 Ecuación de Scherrer	25
2.6.4 Microscopio electrónico de barrido (MEB)	25

2.6.5	Espectroscopia por UV-vis	27
2.6.6	Ley de Beer-Lambert	28
CAPÍTULO III MATERIALES Y MÉTODOS		29
3.1	Obtención de películas delgadas de β -Ga ₂ O ₃	29
3.1.1	Limpieza de sustratos	29
3.1.2	Horno tubular.....	30
3.1.3	Síntesis de Ga ₂ O ₃ mediante oxidación térmica	31
3.2	Caracterización de películas delgadas de β -Ga ₂ O ₃	32
3.2.1	Caracterización por difracción de rayos x	32
3.2.2	Caracterización por microscopía electrónica de barrido	33
3.2.3	Caracterización por espectroscopia ultravioleta visible	34
3.3	Fotodegradación.....	34
3.3.1	Construcción de la cámara de reacciones	35
3.3.2	Molaridad del azul de metileno	36
3.5	Simulación computacional	36
3.5.1	Simulación de un sustrato de GaAs (1 0 0).....	37
3.5.2	Simulación de un sustrato de GaAs (1 1 1).....	37
3.5.3	Simulación de una película de Al ₂ O ₃	38
3.5.4	Simulación de una película de Ga ₂ O ₃	38
CAPÍTULO IV RESULTADOS Y DISCUSIONES		40
4.1	Síntesis de las nanoestructuras de β -Ga ₂ O ₃	40
4.2	Caracterización de Difracción de Rayos X.....	41
4.3	Caracterización de Microscopía Electrónica de Barrido	42
4.4	Caracterización de UV-vis	43
4.5	Resultados de simulación	45
4.5.1	Simulación de un sustrato de GaAs (1 0 0).....	45
4.5.2	Simulación de un sustrato de GaAs (1 1 1).....	47

4.5.3	Simulación de una película de Al_2O_3	50
4.5.4	Simulación de una película de Ga_2O_3	51
CAPÍTULO V CONCLUSIONES.....		55
5.1	Trabajos a futuro	56
REFERENCIAS		57
ANEXOS.....		64
	Anexo A: Script del Sustrato GaAs (1 0 0).....	64
	Anexo B: Script del Sustrato GaAs (1 1 1)	66
	Anexo C: Script del Depósito de Al_2O_3	68
	Anexo D: Script del Depósito de Ga_2O_3	70
	Anexo E: Productividad Académica	74

CAPÍTULO I INTRODUCCIÓN

1.1 Introducción

Los óxidos semiconductores como películas delgadas juegan un papel importante en aplicaciones como la microelectrónica [1] y los dispositivos opto electrónicos [2, 3], debido a sus propiedades eléctricas (conductividad térmica de 0.1 a 0.3 W / cm K) y ópticas (transparencia en el rango UV-C y NIR); borde de absorción de 255 a 260 nm; e índice de refracción, el cual varía linealmente con la temperatura $10^{-5}/^{\circ}\text{C}$ [4]. En los últimos años, los óxido más estudiados han sido: el óxido de zinc (ZnO), óxido de titanio (TiO_2), óxido de estaño (SnO_2), óxido de galio (Ga_2O_3), entre otros debido a su longitud de onda corta, estabilidad química y bajo costo [5].

En particular, las películas delgadas de óxido de galio (Ga_2O_3) han generado interés como un material importante para varias aplicaciones, incluidos catalizadores [6], sensores de gas [7], celdas solares [8] y dispositivos electrónicos de potencia y alto voltaje [4]; debido a que tiene propiedades conductoras ideales y es eléctrica y termodinámicamente estable [9].

Estructuras cristalinas de $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ se han sintetizado mediante diversas técnicas, incluido el método Czochralski (CZ) [10], de zona flotante (FZ) [11], o Bridgman (horizontal o vertical, HB y VB) [12]. Los cristales a granel (mayormente fabricados por el método de crecimiento de película alimentada de bordes definidos, EFG) [13] proporcionan una plantilla para el crecimiento de películas epitaxiales de espesor controlado para canales activos y capas de contacto para permitir el logro de parámetros específicos del dispositivo, como el voltaje de

ruptura, la resistencia en el estado, y el tiempo de recuperación inversa. Es importante mencionar que el propósito de este trabajo es sintetizar óxido de galio para aplicarlo en fotodegradación.

1.2 Declaración del problema

El desarrollo económico y social de los países ha provocado un incremento de forma exponencial en el uso de los recursos naturales; este consumo ha causado una contaminación en el agua y el aire de impacto mundial sin precedentes. A finales de la década de los 60's del siglo pasado, el desarrollo sustentable fue implementado con el fin de solucionar los problemas ambientales; es decir, una alternativa de desarrollo capaz de satisfacer las necesidades de la sociedad sin afectar las condiciones de futuras generaciones [14].

Derivado del desarrollo sustentable, desde hace más de 20 años, se ha estudiado el uso de fotocatalizadores semiconductores para contribuir a la protección del ambiente, ya que éstos materiales pueden degradar o mineralizar una amplia gama de contaminantes orgánicos y patógenos [15]; a pesar de las diversas investigaciones, la baja eficiencia ha incitado a la búsqueda de materiales con mayor eficiencia y bajo costo de producción.

En la actualidad, óxidos semiconductores como el óxido de titanio (TiO_2) y el estanato de zinc (Zn_2SnO_4) se han sintetizado para su aplicación en fotodegradación; sin embargo, estos materiales necesitan ser impurificados (dopados) debido a la recombinación de electrones, lo cual representa un mayor costo de producción.

1.3 Justificación

Debido a los impedimentos mencionados en el apartado anterior, se propone usar el óxido de galio como una alternativa de material fotocatalítico; ya que este material nos permite sintetizarlo fácilmente sin ser impurificado.

1.4 Objetivo general

Sintetizar y caracterizar nanoestructuras de $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ usando la técnica de depósito de oxidación térmica para su aplicación en fotodegradación de agua contaminada.

1.5 Objetivos particulares

1. Sintetizar nanoestructuras de $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ mediante la técnica de oxidación térmica controlada para estudiarlas como material fotocatalítico.
2. Caracterizar las películas delgadas de $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ por medio de UV-vis, XRD y SEM para conocer sus propiedades ópticas y estructurales.
3. Realizar pruebas de fotodegradación en agua contaminada con azul de metileno usando luz UV.
4. Simular mediante LAMMPS el crecimiento del $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ y comparar los resultados experimentales con los teóricos.

CAPÍTULO II MARCO TEÓRICO

2.1 Estado del arte

Yidong Hou et. al. (2007) evaluaron las actividades fotocatalíticas de tres polimorfos de Ga_2O_3 (α , β , γ), los cuales fueron obtenidos mediante calcinación. Los resultados demostraron que la actividad fotocatalítica fue fuertemente influenciada por la estructura cristalina, la cual disminuye en el siguiente orden: $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3 > \alpha\text{-Ga}_2\text{O}_3 > \gamma\text{-Ga}_2\text{O}_3$. Los autores concluyeron que la actividad fotocatalítica de los polimorfos Ga_2O_3 depende de su cristalinidad, estructura geométrica y propiedades electrónicas; además, encontraron que los catalizadores de Ga_2O_3 exhibían una actividad fotocatalítica mucho mayor que el TiO_2 comercial [16].

Por otra parte, Baoxiu Zhao y Pengyi Zhang (2009) investigaron la descomposición fotocatalítica del ácido perfluorooctanoico (PFOA) con un fotocatalizador de ancho de banda prohibido amplio (4.9 eV). El $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ se preparó con nitrato de galio y amoníaco para después radiarse con microondas y calentarlo en un horno a 100, 500 y 800 °C bajo radiación UV de 254 nm. Debido a que los electrones fotogenerados en la banda de conducción del $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ poseen una fuerte capacidad reductora, las moléculas de PFOA adsorbidas en su superficie podrían destruirse reductiva y simultáneamente liberar iones de fluoruro en la solución [17].

Yidong Hou et. al. (2010) continua con su investigación (mencionada al inicio de esta sección), esta vez con muestras nanoestructuradas de $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$ (nanovarillas y esferas), las cuales fueron obtenidas mediante una combinación

de procesos solvotermales y posteriormente tratamientos térmicos. Los resultados revelaron que la muestra de β -Ga₂O₃ preparada con etilenglicol mostró la mayor actividad fotocatalítica para la degradación del ácido salicílico. Finalmente, llegaron a la conclusión que los resultados fueron obtenidos gracias a la gran superficie específica, abundantes grupos hidroxilo y el amplio ancho de banda de la muestra de β -Ga₂O₃ sintetizada en etilenglicol [18].

Yoshihisa Sakata et. al. (2011) compararon dos muestras de Ga₂O₃ como fotocatalizadores: una muestra adquirida en el mercado [High Purity Chemical; Ga₂O₃ (P)] y la otra fue obtenida por calcinación de un precursor de hidróxido de galio preparado por hidrólisis de Ga(NO₃)₃ con NH₃ acuoso a pH9 [Ga₂O₃ (M)] a 1,273 K durante 6 h. La estructura cristalina de ambos óxidos de galio eran de fase β y el intervalo de ancho de banda prohibido de 4.8 eV, según se determina a partir del espectro de absorción de UV. Realizaron las reacciones fotocatalíticas en una celda de fotorreacción del tipo de irradiación interna hecha de vidrio de cuarzo. Como resultado obtuvieron que la muestra de β -Ga₂O₃ preparada con etilenglicol mostró la mayor actividad fotocatalítica para la degradación del ácido salicílico [19].

Shaoqing Jin et. al. (2015) estudiaron la reacción fotocatalítica general de separación del agua; esta se logró en fotocatalizadores con composiciones de fase pura y mixta de γ -Ga₂O₃ y β -Ga₂O₃. Todos los fotocatalizadores de Ga₂O₃ pueden dividir el agua estequiométricamente en H₂ y O₂; sin embargo, el fotocatalizador de fase mixta γ / β -Ga₂O₃ con una pequeña cantidad de fase β muestra la actividad más baja. Por otro lado, el sistema α / β -Ga₂O₃ mezclado con una pequeña cantidad de fase β presenta una actividad fotocatalítica mucho mayor que las fases individuales. En relación al análisis de sistemas α / β Ga₂O₃

y Υ / β Ga_2O_3 , determinaron que la estructura en la interfaz no debe presentar desorden o defectos para que la formación de reacciones estimulen la unión de fases [20].

2.1 Óxidos Semiconductores Transparentes

Los óxidos semiconductores transparentes (TCOs) son materiales capaces de conducir electricidad y tienen una baja absorción de luz [21]. Con frecuencia, los TCOs se sintetizan con tecnología de películas delgadas [22, 23, 24] y son utilizados en dispositivos optoelectrónicos como celdas solares [25], diodos emisores de luz (LED) [26] y fotodetectores [3].

Los TCOs se encuentran en un punto intermedio de la fibra óptica (conductor de luz altamente eficiente, pero aislante eléctrico) y los semiconductores compuestos de silicio (resistencia óptica dependiente de la longitud de onda, pero conductor eléctrico dependiente del dopante) debido a que son flexibles en conductividad (puede ajustarse desde aislante, hasta conductor) y transparencia. Es importante mencionar que, al crear conductores tipo N y tipo P, la gama de circuitos optoelectrónicos de ahorro de energía y las aplicaciones tecnológicas es muy amplia [27].

2.2 Óxido de galio

El Ga_2O_3 es un TCO el cual presenta cinco fases (α , β , γ , δ y ϵ) cuyas propiedades en forma de nanoestructuras han provocado un gran interés durante

las últimas décadas. La variedad de estructuras obtenidas y el aprovechamiento de sus propiedades intrínsecas (gran estabilidad química y térmica, ancho de banda ~ 4.8 eV, control de la conductividad eléctrica mediante impurezas, propiedades de luminiscencia sintonizables, etc.) han permitido el desarrollo de aplicaciones en la rama de la optoelectrónica: desde sensores de gases de alta temperatura hasta fotodetectores.

2.2.1 Propiedades eléctricas

En trabajos previos, utilizaron el enfoque de la teoría funcional de la densidad (DFT) [28] a pesar de proporcionar resultados satisfactorios, esta teoría subestima los valores de banda prohibida. Después, utilizando la teoría funcional de densidad híbrida encontraron resultados más precisos. Este cambio permitió extraer datos como un ancho de banda de 4.8 eV y una masa efectiva del electrón de $\sim 0.23 m_0$ [29].

2.2.2 Propiedades estructurales

El β -Ga₂O₃ monoclinico es la forma termodinámicamente más estable (hasta su punto de fusión) con constantes de red con valores de $a=12.2$ Å, $b=3.0$ Å y $c=5.8$ Å. [30] Esta es la única estructura cristalina que se puede crecer a partir de la masa fundida, además de ser atractivo debido a su estabilidad y facilidad de fabricación. Para poder formar β -Ga₂O₃ es necesario alcanzar temperaturas de 750° a 900° C, incluso para el crecimiento heteroepitaxial en sustratos no

nativos. [31, 10]. En la figura 1 se muestra un esquema de la celda unitaria de β -Ga₂O₃.

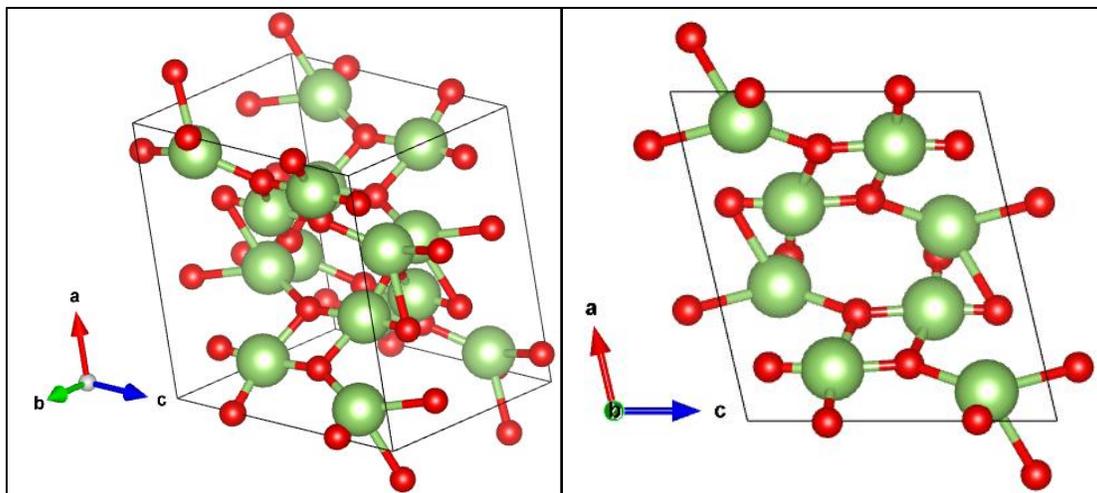


Figura 1. Representación de la estructura cristalina del β -Ga₂O₃. Los átomos de Ga están en verde y los átomos de O en rojo.

2.2.3 Propiedades ópticas

Gracias a su amplio ancho de banda, el β -Ga₂O₃ estequiométrico puro es incoloro y muy transparente, llegando hasta el rango UV-C (200 – 280 nm) del espectro electromagnético; sin embargo, el material puede llegar a presentar coloración debido a impurezas y condiciones de crecimiento [4]. Las muestras que tienen una baja concentración de electrones presentan un borde de absorción de 255-260 nm y una transparencia del rango de longitud de onda del infrarrojo cercano (NIR); esto es debido a la transición de la banda de valencia a la banda de conducción [32]. En la tabla 1, se mencionan las propiedades más importantes del β -Ga₂O₃.

Debido a que el Ga_2O_3 tiene un ancho de banda muy amplio, en la tabla 2 se presenta una recopilación de algunos valores reportados para esta propiedad.

Tabla 1. Resumen de las propiedades más importantes del $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$.

Propiedad	Valor	Ref
Estructura cristalina	Monoclínica C2/m	[10]
Densidad (300 K)	5.75 g/cm ³	[33]
Punto de fusión	1795 K	[4]
Ancho de banda (300 K)	4.5-4.9 eV	[34]
Índice de refracción	1.68-1.89	[30]
Constante dieléctrica	9.9-10.2	[30]
m_e^*/m_0	0.23-0.24	[29]

Tabla 2. Comparación de los diferentes valores reportados para el ancho de banda.

Autor	Año	Sustrato	Síntesis	Ancho de banda (300 K)	Ref
Tomm, Y., et al.	2000	5N Ga_2O_3	Czochralski	4.8 eV	[10]
Orita, Masahiro, et al.	2000	Vidrio de sílice	Láser pulsado	4.9	[35]
Janowitz, Christoph, et al.	2011	-	Czochralski	4.85 ± 1 eV	[4]
Onuma, Takeyoshi, et al.	2015	Semiaislante/ Semiaislante impurificado con Mg	Zona flotante	4.4 – 5.0	[36]
Higashiwaki, M., & Jessen, G. H.	2018	-	-	4.5-4.9	[37]

2.3 Oxidación térmica controlada

La oxidación térmica controlada es un método de depósito en el cual, el sustrato en estado sólido es calentado en una atmósfera de oxígeno mediante un aumento de temperatura hasta que se produce su sublimación y reacción química con el oxígeno libre. Según el material, los parámetros de temperatura variarán [38]. El proceso de calentamiento se divide en varias etapas las cuales constan de un precalentamiento, un calentamiento a la temperatura de reacción y una etapa de preservación de calor en la temperatura de reacción [39].

2.4 Dinámica molecular

La Dinámica Molecular (DM) consiste en resolver computacionalmente las ecuaciones clásicas de movimiento para un sistema compuesto de átomos y moléculas con el objetivo de obtener la evolución en el tiempo del sistema [40].

Las simulaciones de dinámica molecular se pueden aplicar en tres áreas principales en la actualidad: En primer lugar, la simulación DM se utiliza para dar vida a las estructuras biomoleculares; en segundo lugar, la simulación de DM proporciona promedios térmicos de propiedades moleculares; por último, DM puede explorar qué conformaciones de una molécula o un complejo son térmicamente accesibles [41].

2.4.1 Potenciales

Para aplicar un algoritmo en DM se necesita un potencial de enlace entre los átomos que describa el sistema. Estos potenciales se dividen en dos: Fundamental y empírico. Los potenciales fundamentales dan una descripción extraordinariamente precisa y realista del sistema, pero generalmente resultan bastante complejos de implementar a no ser que se hagan aproximaciones, las cuales reducen, a veces de manera bastante significativa, la exactitud del resultado final. Incluso con estas aproximaciones, este tipo de potenciales resultan extraordinariamente costosos, hablando en términos de memoria y ciclos de CPU consumidos.

Por otra parte, los potenciales empíricos están limitados a ciertos sistemas y a veces la descripción de estos sistemas no es completa o muy precisa; pero generalmente la descripción resulta lo suficientemente profunda para ser útil. En cambio, los potenciales empíricos resultan muy rápidos y sencillos de implementar. Su problema principal radica en que usan parámetros que deben ser ajustados muy cuidadosamente, y que la utilidad de estos parámetros suele encontrarse limitada al sistema para el que fueron extraídos.

2.4.2 Software

En la actualidad existen varios programas capaces de llevar a cabo las simulaciones de DM, y a su vez existen varios campos de fuerza, que en general pueden utilizarse con diversos programas [42]. Los paquetes de simulación más populares son:

- Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (LAMMPS)
- OpenMM
- Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics (CHARMM)
- Assisted Model Building with Energy Refinement (AMBER)
- Not (just) Another Molecular Dynamics program (NAMD)
- Groningen Machine for Chemical Simulations (GROMACS)

2.5 Visualizador molecular

Los visualizadores moleculares fueron desarrollados con el objetivo de observar la geometría molecular y analizar las propiedades electrónicas, a través de los resultados obtenidos en el cálculo computacional. Algunos ejemplos de visualizadores son [43]:

- Open Visualization Tool (OVITO)
- Visual Molecular Dynamics (VMD)
- Molecular Density (MOLDEN)
- UCSF Chimera
- Molekel
- Spartan
- Avogadro
- Python Molecule (PyMol)

2.6 Métodos de caracterización

Las técnicas de caracterización de materiales, tal como la microscopía eléctrica de barrido (MEB), la espectroscopia por UV-vis y la difracción de rayos X (DRX) son herramientas valiosas empleadas en el análisis de estructuras y la composición de materiales naturales y artificiales; siendo empleados en diferentes áreas científicas [44].

2.6.1 Difracción de rayos x (DRX)

La DRX es una herramienta importante para caracterizar los semiconductores compuestos y las respectivas estructuras cristalinas debido a las constantes de red muy pequeñas de los cristales inorgánicos (fracciones de nanómetros para nuestros semiconductores compuestos) y sus propiedades reticulares cristalinas no se pueden analizar con microscopía óptica; por lo tanto, se requiere iluminación con una longitud de onda mucho más corta. Con esta técnica se pueden obtener [45]:

- Constantes de red
- Composición química de ternarios, cuaternarios, etc.
- Deformación
- Tamaño de cristal
- Densidad de dislocación
- Período de superredes

En la figura 2 se muestra un diagrama representativo del funcionamiento del DRX.

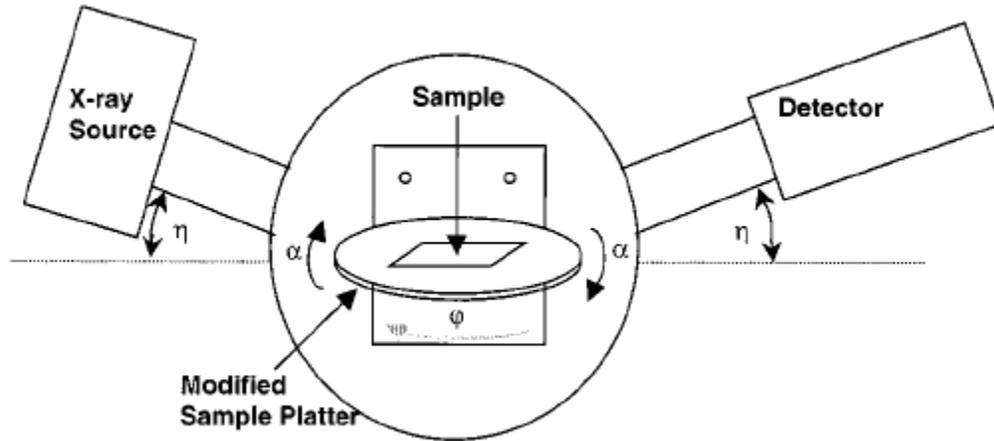


Figura 2. Diagrama esquemático de un DRX.

2.6.2 Ley de Bragg

La ley de Bragg predice la dirección en la que se da la interferencia constructiva entre haces de rayos x dispersados por un cristal [46]. La ecuación se expresa como:

$$n\lambda = 2d \sin \theta$$

Dónde: n es un número entero, en caso contrario, los rayos quedan en contrafase y se anulan o debilitan; λ es la longitud de onda; d es la distancia interplanar; y θ es el ángulo de Bragg. En la figura 3 se presenta un esquema de esta ley.

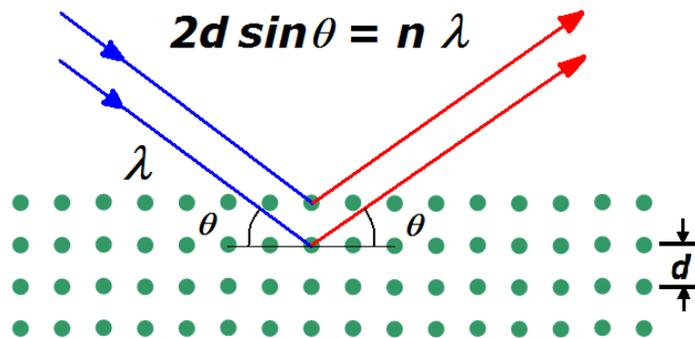


Figura 3. Representación esquemática de la ley de Bragg.

2.6.3 Ecuación de Scherrer

Como se mencionó en el apartado anterior, los resultados de rayos X nos ayuda a determinar el tamaño de las partículas que generan las reflexiones del difractograma. La ecuación de Scherrer relaciona la forma de la reflexión de un plano de átomos y la dimensión del cristal en la dirección de ese plano [45]. La ecuación es:

$$D = \frac{k\lambda}{\beta \cos \theta}$$

Dónde: D es tamaño del cristal; λ es la longitud de onda; θ es el ángulo de Bragg; k es la constante de Scherrer (0.9); y β es el ancho del pico en radianes, conocida como FWHM por sus siglas en inglés. En la figura 4 se presenta un esquema de un pico de difracción.

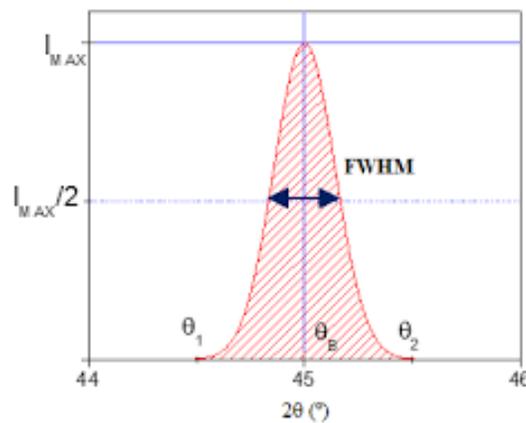


Figura 4. Ejemplo de un patrón de difracción.

2.6.4 Microscopio electrónico de barrido (MEB)

El microscopio electrónico de barrido (MEB) explora la superficie de una muestra punto por punto, al contrario que el microscopio electrónico de

transmisión, que examina una gran parte de la muestra cada vez. Su funcionamiento se basa en recorrer un área con un haz muy concentrado de electrones, de forma parecida al barrido de un haz de electrones por la pantalla de una televisión. Los electrones del haz pueden dispersarse de la muestra o provocar la aparición de electrones secundarios [47].

Algunas características del MEB son [48]:

- Necesidad de alto vacío
- Haz electrónico móvil
- Haz electrónico puntual
- Muestras integra

En la figura 5 se presenta un diagrama esquemático del funcionamiento de un MEB.

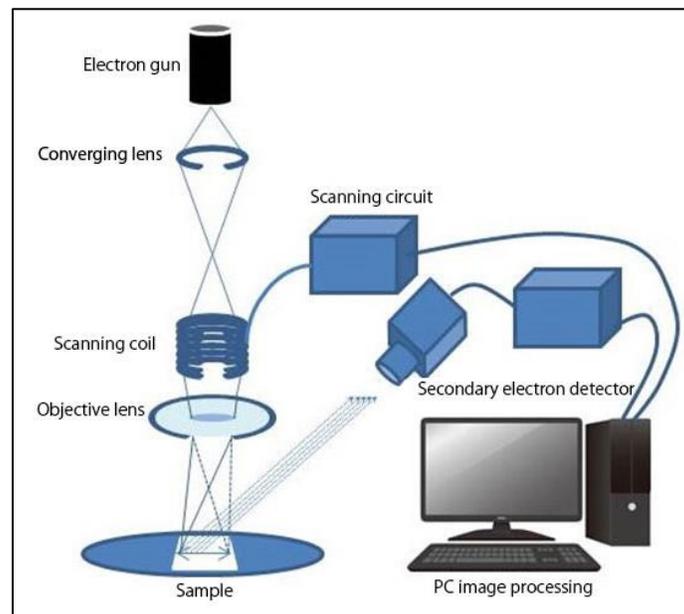


Figura 5. Diagrama esquemático de un MEB.

2.6.5 Espectroscopia por UV-vis

La espectroscopia UV-Vis se basa en el proceso de absorción de la radiación ultravioleta-visible (longitud de onda entre los 160 y 780 nm) por una molécula. La absorción de esta radiación causa que el electrón pase a un estado excitado. Los electrones que se excitan al absorber radiación de esta frecuencia son los electrones de enlace de las moléculas, por lo tanto, los picos de absorción se pueden correlacionar con los distintos tipos de enlace presentes en el compuesto [49]. En la figura 6 se presenta un esquema del espectrofotómetro de UV-vis.

Su aplicación es la siguiente:

- Determinación de grupos funcionales en moléculas orgánicas
- Análisis de muestras bioquímicas
- Determinación de metales en compuestos de coordinación
- Análisis de semiconductores
- Medidas de color
- Determinación cuantitativa
- Seguimiento de la cinética de procesos químicos y bioquímicos

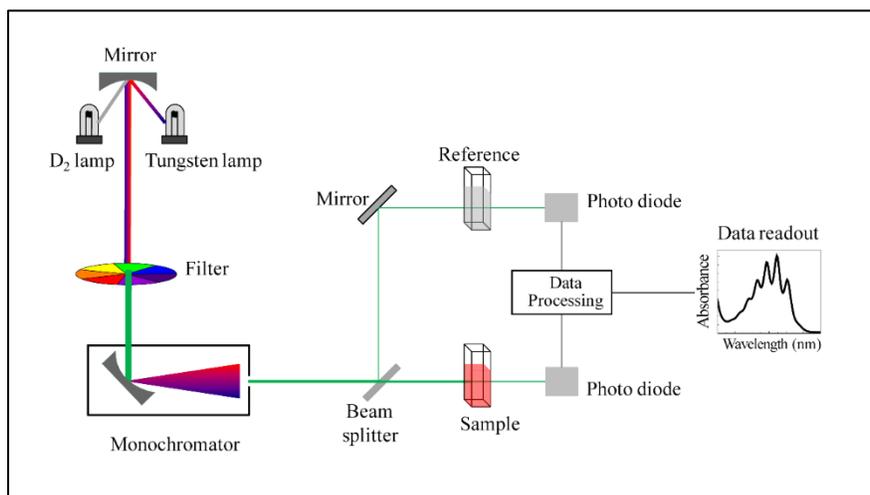


Figura 6. Diagrama esquemático de un espectrofotómetro de UV-vis.

2.6.6 Ley de Beer-Lambert

La ley de Lambert-Beer, también conocida como ley de absorción, relaciona la concentración de un analito absorbente con el espesor de muestra y su absorbancia. [50].

Esta ley explica los tres fenómenos que existen cuando la cantidad de luz transmitida de la muestra es variante, estos parámetros son: La concentración, que es el número de partículas suspendidas en la materia y que la luz tiene que atravesar; la absorbancia, que es la distancia que la luz debe atravesar en la muestra y la cantidad de luz que absorbe la muestra; y por último, la transmitancia, que es la cantidad o fracción de la radiación incidente transmitida [51]. En la figura 7 se presenta un esquema representativo de la reflectancia, absorbancia y transmitancia.

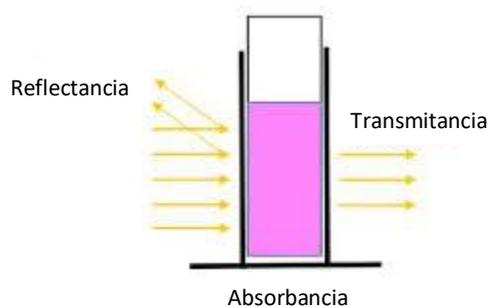


Figura 7. Reflectancia, absorbancia y transmitancia de una celda de cuarzo.

CAPÍTULO III MATERIALES Y MÉTODOS

3.1 Obtención de películas delgadas de β -Ga₂O₃

Esta sección describe el proceso de obtención de las películas de β -Ga₂O₃, el cual consta de una limpieza de sustrato y el crecimiento.

3.1.1 Limpieza de sustratos

Previo a la obtención del Ga₂O₃ es importante hacer una limpieza al sustrato de arseniuro de galio (GaAs) para eliminar polvo, grasa y residuos que se encuentren en la superficie; lo cual permite obtener mejores resultados. Para este trabajo se utilizaron las orientaciones (1 0 0) y (1 1 1) de GaAs.

En la siguiente tabla se muestra el proceso realizado en la limpieza de los sustratos de GaAs.

Tabla 3. Proceso de limpieza para el GaAs.

Solvente/Ácido	Método	Tiempo
H ₂ O	Baño ultrasónico	5 min
Acetona	Baño ultrasónico	5 min
Metanol	Baño ultrasónico	5 min
H ₂ SO ₄ : H ₂ O ₂ : H ₂ O (5:1:1)	Agitar en campana de extracción	2 min
H ₂ O	Baño ultrasónico	5 min
HCl : H ₂ O (1:1)	Agitar en campana de extracción	2 min
H ₂ O	Baño ultrasónico	5 min
Nitrógeno industrial	Quitar residuos de agua	

Una vez concluida la limpieza, los sustratos se colocan en una pala de cuarzo para ser llevadas al horno tubular. En la figura 8 se muestra una máquina de limpieza ultrasónica.



Figura 8. Limpieza de un sustrato de GaAs con acetona.

3.1.2 Horno tubular

Éste horno tubular (ver figura 9) es utilizado cuando los experimentos de laboratorio deben realizarse de forma horizontal, vertical o en ángulos específicos. Algunas características destacables de este equipo son:

- Alcanza una temperatura máxima de 1100°C .
- Tubo de trabajo cerámico C 530 con dos tapones de fibra para funcionamiento bajo aire.
- Termopar tipo S.
- Sistema de control integrado en la base del horno.
- Registro de datos de los procesos con memoria USB.
- Controlador B410 (5 programas con 4 segmentos cada uno).



Figura 9. Horno tubular marca Nabertherm modelo RT 50/250/11.

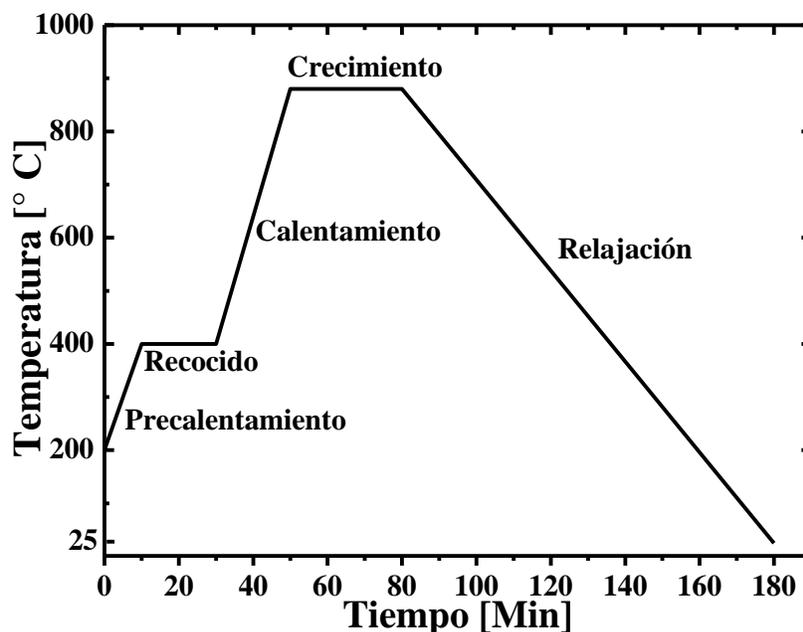
3.1.3 Síntesis de Ga_2O_3 mediante oxidación térmica

Este proceso consiste en colocar los sustratos en una pala de cuarzo lo más centradas posibles a la superficie de ésta para ser colocada en un horno tubular y someterse a una calcinación de 880 °C empleando diferentes rampas de temperatura (ver gráfica 1).

El reactor utilizado permite programar diferentes rampas de temperatura de acuerdo a las necesidades de cada experimento. A continuación, en la tabla 4 se describe el programa usado para la creación del Ga_2O_3 .

Tabla 4. Proceso realizado para la síntesis del óxido de galio.

Etapa	Temperatura (°C)	Tiempo (min)
Pre calentamiento	200 – 400	10
Recocido	400	20
Calentamiento	400 – 880	20
Crecimiento	880	30



Gráfica 1. Rampas de temperatura utilizadas para el proceso de síntesis de $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$. Al final del proceso de síntesis existe una etapa de relajación de 3 horas en promedio.

3.2 Caracterización de películas delgadas de $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$

Es de suma importancia conocer la estructura cristalina y la morfología de las muestras obtenidas y así asegurar que se obtuvieron los resultados deseados; por lo tanto, se realizaron caracterizaciones mediante DRX y MEB.

3.2.1 Caracterización por difracción de rayos x

El equipo utilizado es un Difractómetro de Rayos X marca Rigaku modelo Ultima IV con radiación $\text{Cu} - \text{K}\alpha$ ($\text{K}\alpha = 1.5418 \text{ \AA}$). Para las películas delgadas se utilizó el método de haz paralelo con un haz rasante 2θ y un ángulo de

incidencia de 0.5 a la velocidad de 2 grados por minuto y un barrido de 20° a 80°. En la figura 10 se muestra el difractor utilizado.



Figura 10. Difractor de Rayos X Rigaku Ultima IV.

3.2.2 Caracterización por microscopía electrónica de barrido

El equipo utilizado para obtener las imágenes fue un Microscopio Electrónico de Barrido marca JEOL y su modelo es JSM-7100F (ver figura 11). Las mediciones fueron realizadas a 30,000x de magnitud, a una escala de 100 nm y 5 kV.



Figura 11. SEM marca JEOL modelo JSM-7100F.

3.2.3 Caracterización por espectroscopia ultravioleta visible

El equipo utilizado es un Espectrofotómetro UV-VIS-NIR-3600 marca SHIMADZU. Para realizar las mediciones se utilizó el accesorio de celdas de cuarzo en el cual se puede medir la absorbancia. Esta caracterización es importante debido a la aplicación como material fotocatalítico que se le está dando al Ga_2O_3 ; se espera obtener graficas donde la absorbancia del azul de metileno disminuya conforme al tiempo. En la figura 11 se muestra el espectrofotómetro utilizado.



Figura 12. Espectrofotómetro UV-VIS-VIR marca SHIMADZU.

3.3 Fotodegradación

En este apartado veremos el desarrollo de la construcción de la cámara de reacciones y los cálculos matemáticos de la concentración para el azul de metileno.

3.3.1 Construcción de la cámara de reacciones

La cámara de reacciones debe cumplir con las siguientes características:

- Contar con un espacio totalmente oscuro.
- No presentar reflejos de luz.
- La luz UV debe incidir de forma frontal a la muestra.

El material fue madera con 6 mm de espesor, las paredes se unieron con tornillos y la tapa se unió con pegamento blanco. Se pintó por dentro y fuera con pintura negra mate. En el fondo se puso una plancha de 30 x 29 cm de espuma de poliuretano y en el centro de esta se perforó para añadir un socket de piso; además, se le añadió la altura suficiente para las celdas de cuarzo. En la tabla 5 se presentan las medidas de las piezas utilizadas en la cámara de reacciones, mientras que en la figura 13 se muestra la cámara construida.

Tabla 5. Medidas de la cámara de reacciones.

Pieza	Medida (cm)
Paredes	30 x 30
Tapa	30.5 x 32.5
Paredes de la tapa	30.5 x 2
	32.5 x 2

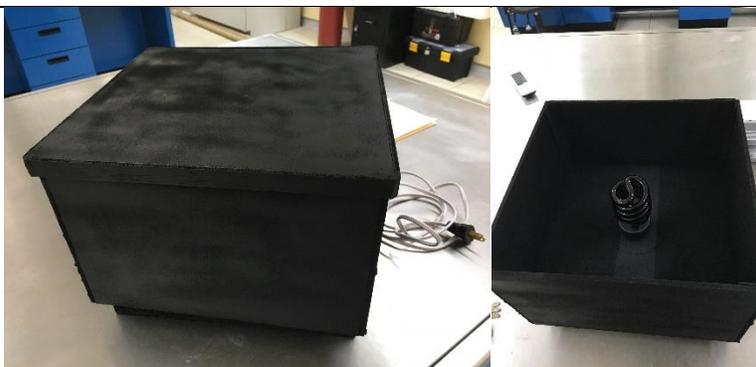


Figura 13. Cámara de reacciones finalizada.

3.3.2 Molaridad del azul de metileno

De acuerdo a los artículos consultados [52, 53] se llegó a la conclusión de que la concentración del azul de metileno debía estar en un rango de 10^{-5} moles/L. Por lo que se procedió a realizar los siguientes cálculos para obtener dicha concentración.

$$\text{Concentración molar} \quad C = \frac{n}{V}$$

$$\text{Masa molar del azul de metileno} \quad \frac{PM(g)}{1 \text{ mol}} = 319.85 \text{ g/mol}$$

$$n = \frac{\text{masa}}{Mm \text{ MB}} = \frac{0.0015 \text{ g}}{319.85 \text{ g/mol}} \rightarrow n = 4.689 \times 10^{-6} \text{ mol}$$

$$C = \frac{4.689 \times 10^{-6}}{0.1 \text{ L}} = 4.689 \times 10^{-5} \text{ moles/L}$$

3.5 Simulación computacional

La estructura de un script de entrada típico de LAMMPS se divide en cuatro partes; las cuales son: inicialización, definición del sistema, configuración de simulación y ejecución de simulación [54]. El directorio de ejemplos de la distribución de LAMMPS contiene ejemplos para los scripts de entrada y puede ser consultado para mayor información.

3.5.1 Simulación de un sustrato de GaAs (1 0 0)

En este script se emuló un sustrato de arseniuro de galio con orientación (1 0 0). Para llevarse a cabo, se utilizó los datos presentados en la siguiente tabla:

Tabla 6. Datos generales para el sustrato de GaAs (1 0 0).

Materiales	GaAs (1 0 0)
Archivo de entrada	GaAs100.in
Archivo de potencial	GaAs.tersoff
Versión de LAMMPS	29 oct 2020
Volumen de simulación	20X20X50 c.u.
GUI	Ovito

Debido a que el GaAs es un material metálico, se usaron unidades metálicas (units metal); dimensiones tridimensionales (3D); condiciones de frontera periódicas (boundary p p p) y un estilo atómico (atom_style atomic). En el Anexo A se encuentra el archivo de entrada de este sustrato. La estructura atómica que se creó fue una red cristalina de tipo Zinc Blenda.

3.5.2 Simulación de un sustrato de GaAs (1 1 1)

Los datos empleados para llevar a cabo la simulación se presentan en la siguiente tabla:

Tabla 7. Datos generales para el sustrato de GaAs (1 1 1).

Materiales	GaAs (1 1 1)
Archivo de entrada	GaAs111.in
Archivo de potencial	GaAs.tersoff
Versión de LAMMPS	29 oct 2020
Volumen de simulación	20X20X50 c.u.
GUI	Ovito

Debido a que esta simulación debe tener planos preferenciales (1 1 1), se usaron orientaciones -2 1 1, 0 -1 1 y 1 1 1 para X, Y y Z, respectivamente. En el Anexo B se encuentra el archivo de entrada de este sustrato.

3.5.3 Simulación de una película de Al_2O_3

Se realizó un script de una película de óxido de aluminio debido a su cercanía en el peso atómico con el galio. En la tabla a continuación se presentan los datos generales del script:

Tabla 8. Datos generales de la película de Al_2O_3 .

Materiales	Al_2O_3
Archivo de entrada	Aluminio.in
Archivo de potencial	AlO.eam.alloy
Versión de LAMMPS	29 oct 2020
Volumen de simulación	20X20X20 c.u.
GUI	Ovito

Para este script se utilizaron unidades metálicas (units metal); dimensiones tridimensionales (3D); condiciones de frontera periódicas (boundary p p p) y un estilo atómico (atom_style atomic). En el anexo C se encuentra el archivo de entrada de esta película delgada.

3.5.4 Simulación de una película de Ga_2O_3

Por último, se realizó un script de una película de óxido de galio donde declaramos temperaturas similares a la fase experimental. En la tabla 9, se presentan los datos generales del script:

Tabla 9. Datos generales para la película de óxido de galio.

Materiales	Ga ₂ O ₃
Archivo de entrada	Ga2O3.in
Archivo de potencial	Ga2O3.tersoff
Versión de LAMMPS	29 oct 2020
Volumen de simulación	56.5X56.5X56.5 Å
GUI	Ovito

Las unidades utilizadas fueron metálicas (units metal); dimensiones tridimensionales (3D); condiciones de frontera no periódicas para el eje Z y periódicas para el eje X y Y (boundary p p f) y un estilo atómico (atom_style atomic). El archivo de entrada de esta película se encuentra en el anexo D.

El potencial utilizado para esta simulación fue generado a través de Tersoff, el cual fue obtenido por medio de una tesis [55] debido a que no existe un potencial para β -Ga₂O₃. Otra opción es hibridar dos potenciales de la misma naturaleza, pero esto causa que el desarrollo del script de entrada sea más complejo.

CAPÍTULO IV RESULTADOS Y DISCUSIONES

4.1 Síntesis de las nanoestructuras de β -Ga₂O₃

Se obtuvieron 10 muestras de Ga₂O₃ de los cuales, 5 sobre GaAs (1 0 0) y las 5 restantes en GaAs (1 1 1). Debido al tiempo de crecimiento y la temperatura usada durante el proceso es posible que el arsénico sublime casi en su totalidad, del sustrato de GaAs. En la figura 14 podemos observar dos muestras obtenidas con los parámetros de crecimiento previamente mencionados en el capítulo III.

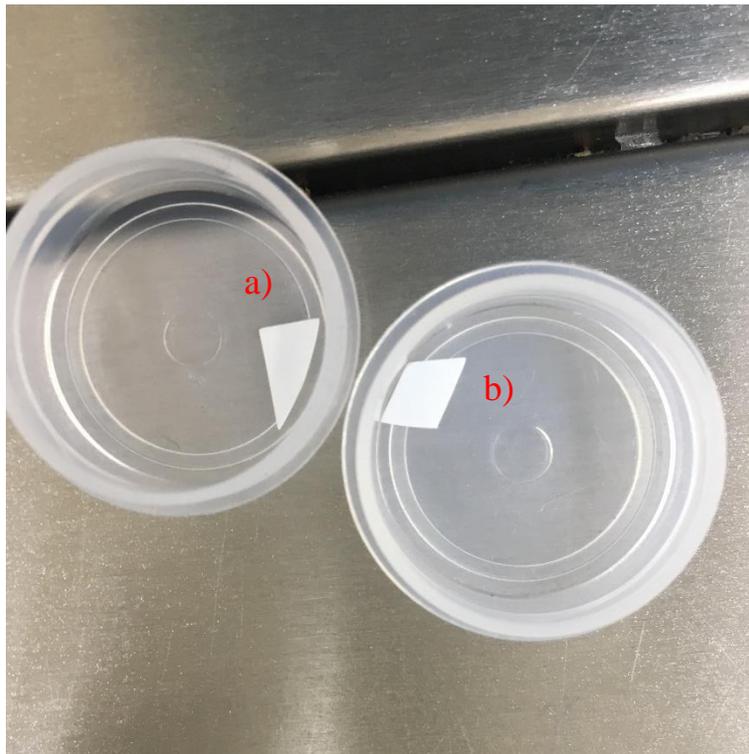
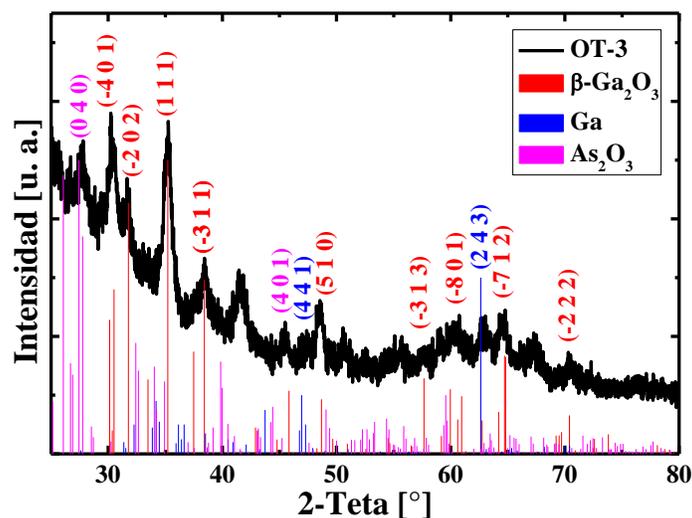


Figura 14. Ga₂O₃ obtenido mediante el proceso de OTC. Corresponde a) GaAs (1 0 0) y b) GaAs (1 1 1).

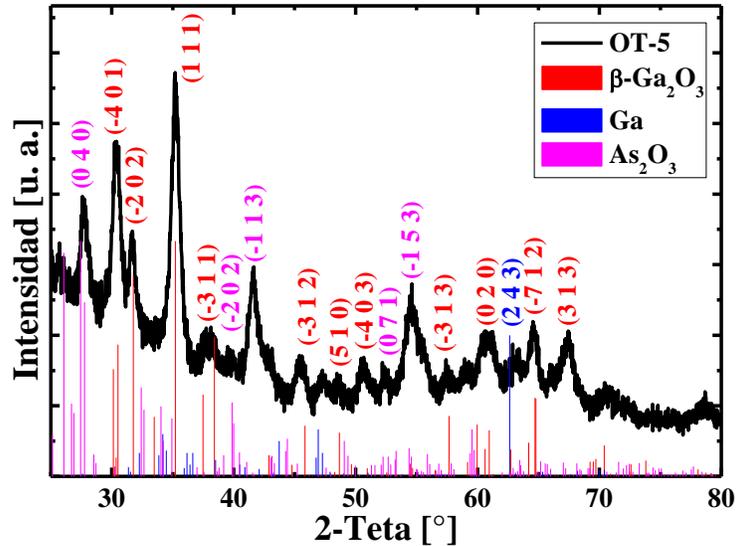
4.2 Caracterización de Difracción de Rayos X

El análisis de los difractogramas se realizó con la tarjeta cristalográfica No. 01-087-1901, 00-025-0344 y 03-065-9773 las cuales corresponden al β -Ga₂O₃, Ga y As₂O₃ respectivamente. En la gráfica 2 se muestra el difractograma de la muestra OT-3, película sintetizada con un sustrato de GaAs con orientación (1 1 1). En esta gráfica se puede apreciar los siguientes patrones de difracción: ($\bar{2}$ 0 2) ubicado en $2\theta = 31.74^\circ$; (1 1 1) $2\theta = 35.19^\circ$; el patrón ($\bar{3}$ 1 1) en $2\theta = 38.38^\circ$; y el pico ($\bar{7}$ 1 2) localizado en $2\theta = 64.76^\circ$. El tamaño de cristal del plano preferencial (1 1 1) es de 11.029 nm.



Gráfica 2. Difractograma de la muestra OT-3.

La gráfica 3 corresponde a la muestra OT-5 [sustrato GaAs con orientación (1 0 0)] se puede apreciar nuevamente los patrones de difracción ($\bar{2}$ 0 2), (1 1 1), ($\bar{3}$ 1 1) y ($\bar{7}$ 1 2); siendo el pico (1 1 1) el de mayor intensidad y se encuentra en $2\theta = 35.21^\circ$. El tamaño de cristal del plano preferencial (1 1 1) es de 10.132 nm.



Gráfica 3. Difractograma de la muestra OT-5.

En el proceso de limpieza de los sustratos (ver tabla 3) es necesario enjuagar con agua desionizada después de los procesos con ácidos, esto debido a que quedan pequeños residuos que al hacer contacto con las pinzas manchan los sustratos. Evitar enjuagar los sustratos provoca que los resultados de DRX difieran incluso en sustratos con la misma orientación.

4.3 Caracterización de Microscopía Electrónica de Barrido

A continuación se muestran los resultados obtenidos en el microscopio electrónico de barrido (MEB). Las figuras 15 y 16 corresponden a la muestra OT-1; con la ayuda del programa ImageJ se pudo analizar con mayor precisión los resultados obteniendo una película porosa homogénea con tamaños de granos regulares y valores para la densidad de poros de ~21 nm y diámetro de poro de ~61 nm.

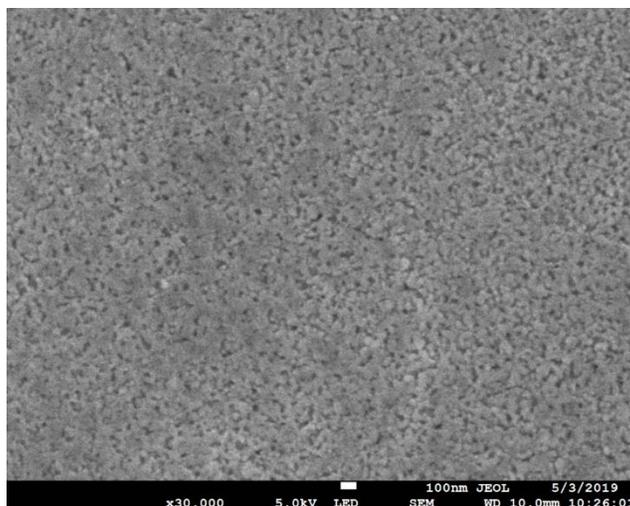


Figura 15. Muestra OT-1.

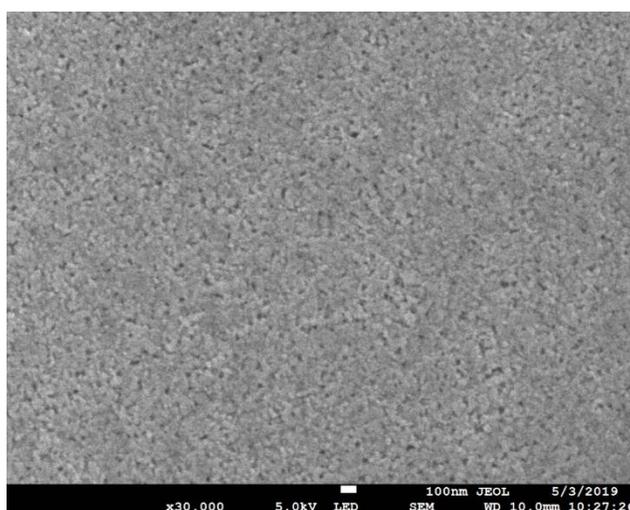
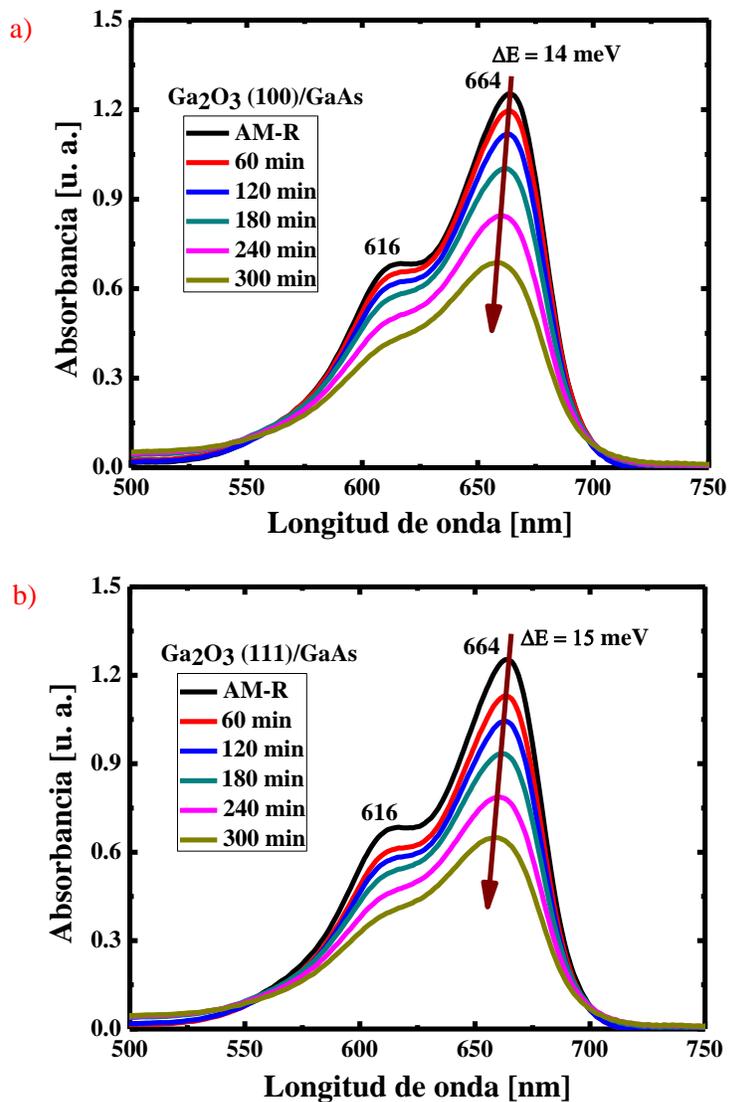


Figura 16. Zona 2 de la muestra OT-1.

4.4 Caracterización de UV-vis

Los espectros UV-Vis de las soluciones acuosas de azul de metileno en presencia de las muestras, adquiridos en varios puntos de tiempo durante su exposición a la luz, se muestran en la gráfica 4; es posible observar que a mayor exposición de irradiación, la solución presenta mayor incoloración. La muestra

preparada con un sustrato de GaAs con orientación (1 0 0) presentó valores más bajos de absorbancia a comparación de la muestra preparada con un sustrato de GaAs con orientación (1 1 1).



Gráfica 4. Espectro UV-vis de soluciones de azul de metileno para Ga_2O_3 con sustrato base a) GaAs (1 0 0) con una degradación del 57% y b) (1 1 1) con una degradación del 61%.

4.5 Resultados de simulación

En este apartado se presentan los resultados de cada una de las simulaciones realizadas en este trabajo.

4.5.1 Simulación de un sustrato de GaAs (1 0 0)

Al final de la simulación se crearon 1017 átomos, de los cuales 576 corresponden al galio y 441 al arseniuro; además, se obtuvo una longitud en la caja de 5.65, 5.65 y 5.65 para X, Y, Z respectivamente. Debido a que el propósito principal de este script era visualizar la posición de los átomos, no se declararon parámetros para ver el comportamiento con el paso del tiempo.

En las figuras 17 y 18 se puede observar de diferentes ángulos los resultados de los cálculos matemáticos realizados a través de LAMMPS y representados en el visualizador molecular Ovito. En el anexo A se presenta el script de entrada realizado para este sustrato, en él se podrán consultar los valores como la constante de red, masa, grupos, etc.

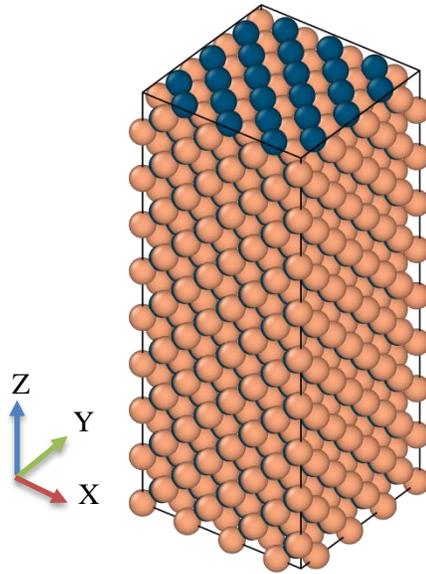


Figura 17. Perspectiva del sustrato de GaAs con orientación (1 0 0), donde los átomos rojos son galio y los átomos azules son arseniuro.

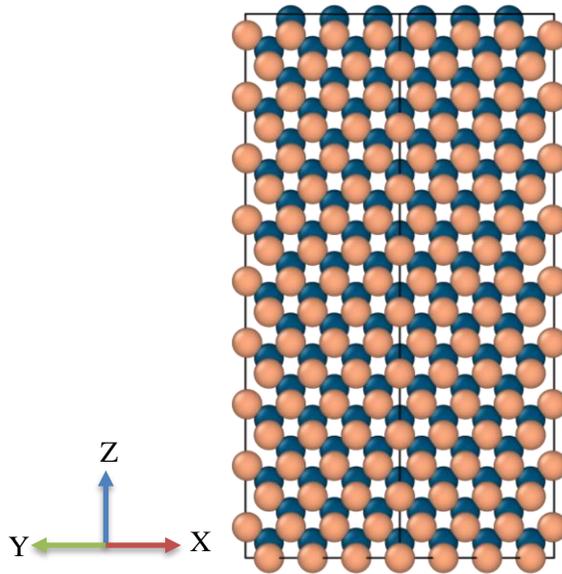


Figura 18. Vista en la posición (1, 1, 0) del sustrato de GaAs con orientación (1 0 0), donde los átomos rojos son galio y los átomos azules son arseniuro.

4.5.2 Simulación de un sustrato de GaAs (1 1 1)

En esta simulación se crearon 1008 átomos, de los cuales 517 corresponden al galio y 491 al arseniuro; la longitud de la caja fue de 9.226, 7.99 y 9.786 para X, Y, Z respectivamente. Al igual que el script anterior, el propósito principal fue visualizar la posición de los átomos, por lo tanto, no se declararon parámetros para observar su desarrollo con el paso del tiempo.

En las figuras 19 y 20 se presenta, a través de Ovito, los resultados numéricos obtenidos por LAMMPS.

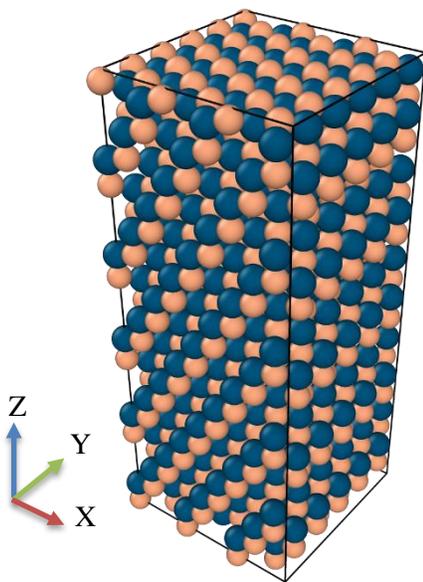


Figura 19. Vista alzada frontal del sustrato de GaAs con orientación (1 1 1), donde los átomos rojos son galio y los átomos azules son arseniuro.

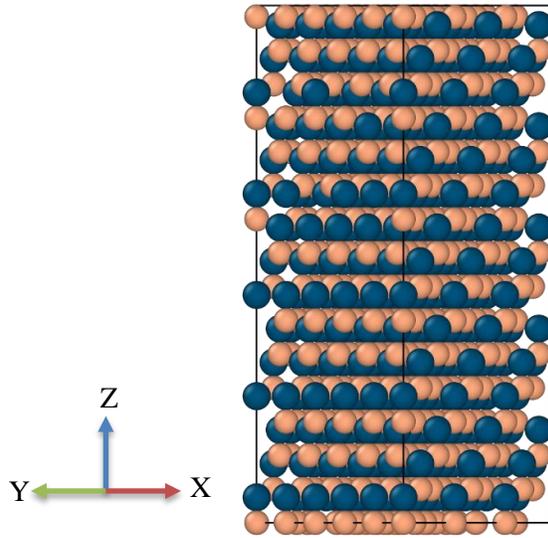


Figura 20. Vista en la posición (1, 1, 0) del sustrato de GaAs con orientación (1 1 1), donde los átomos rojos son galio y los átomos azules son arseniuro.

A continuación, en la figura 21 se presenta una comparación del GaAs en ambas orientaciones con un corte en el plano (1 0 0). Como podemos observar, en ambas se presenta una secuencia de apilamiento del tipo cúbico centrado en las caras (FCC) es decir, los átomos están situados en los vértices de la celda unidad y en el centro de sus caras.

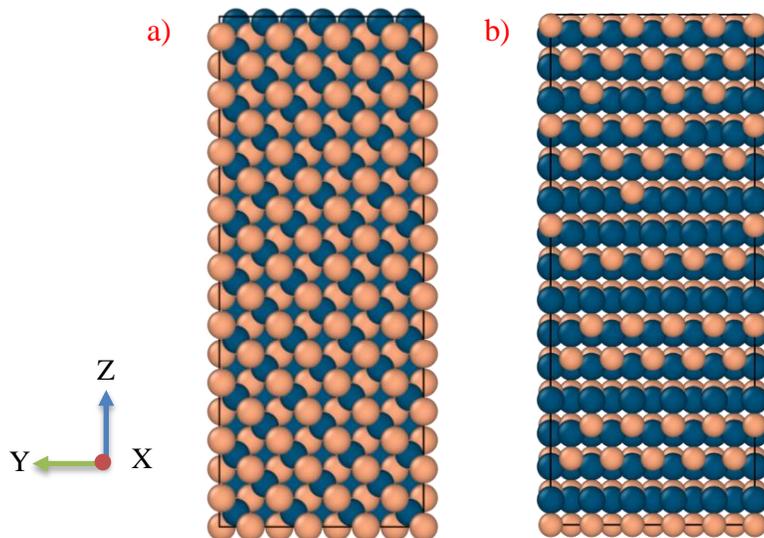


Figura 21. Comparación de los sustratos de GaAs a) (1 0 0) y b) (1 1 1) con un corte en el plano (1 0 0).

En la figura 22 y 23, podemos visualizar de mejor forma esta secuencia de apilamiento en donde tenemos tres posiciones indicadas por A, B y C. Esta secuencia se puede ordenar de manera arbitraria, pero en la naturaleza las secuencias ABCABC es la más común. En el anexo B se encuentra el script de entrada para el sustrato GaAs (1 1 1) en donde se podrá consultar los arreglos termodinámicos.

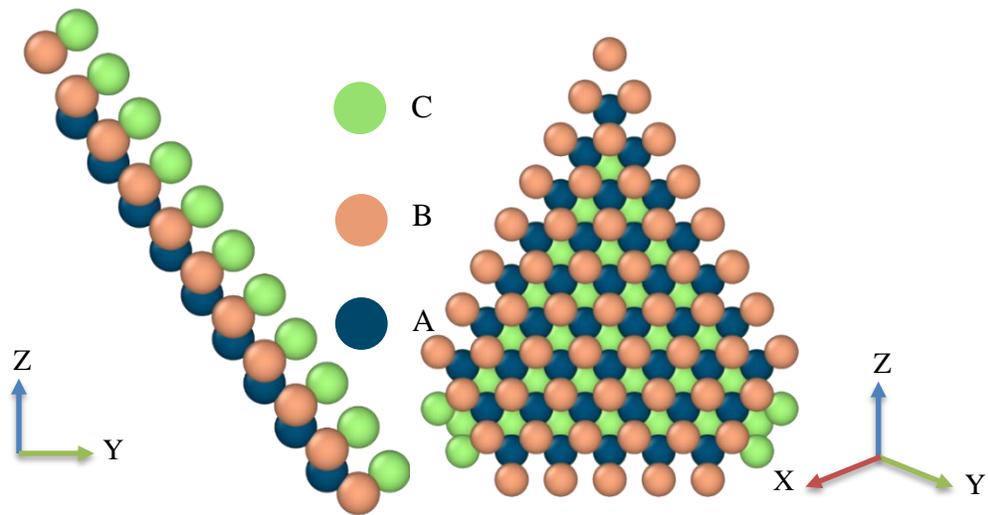


Figura 22. Secuencia de apilamiento del sustrato de GaAs (1 0 0).

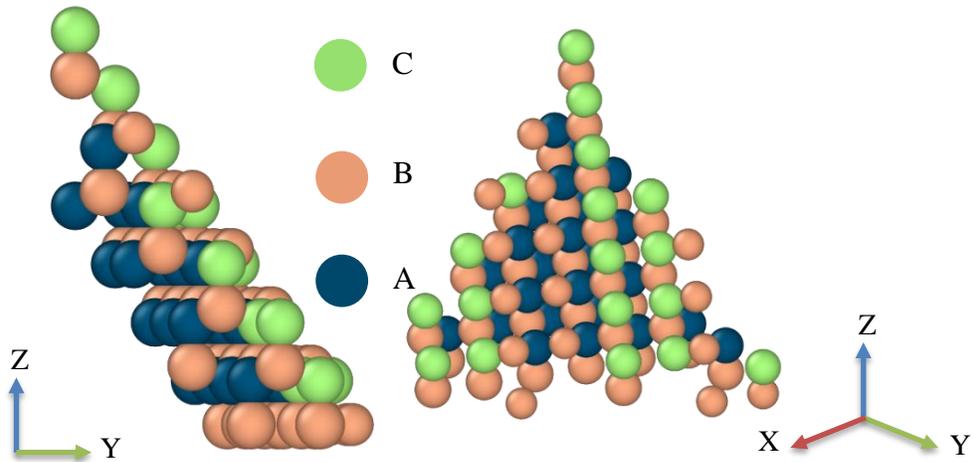


Figura 23. Secuencia de apilamiento del sustrato de GaAs (1 1 1).

4.5.3 Simulación de una película de Al_2O_3

En esta simulación se crearon 4 grupos llamados Aluminio, Oxígeno, AlO, Al y O; con el propósito de poder crear interacciones entre los átomos de aluminio y oxígeno. Al finalizar la simulación se crearon 621 átomos, de los cuales 290 corresponden al oxígeno y 331 al aluminio; la longitud de la caja fue de 4.78, 4.78 y 4.78 para X, Y, Z respectivamente.

Las condiciones termodinámicas declaradas para este script fue un ensamble canónico en el cual, se tiene un número de partículas, volumen y temperatura determinados. La primera configuración de temperatura fue 480 K, lo que equivale a 206.85°C , para después se aumentó la temperatura a 680 K, que son 406.85°C . Los pasos de tiempo para realizar todo el proceso fueron 1000, dando un archivo de salida con 10 cuadros de tiempo en donde observamos que las partículas vibran con la temperatura y el paso del tiempo.

En la figura 24 se presentan los resultados numéricos obtenidos por LAMMPS, los cuales se visualizaron en Ovito.

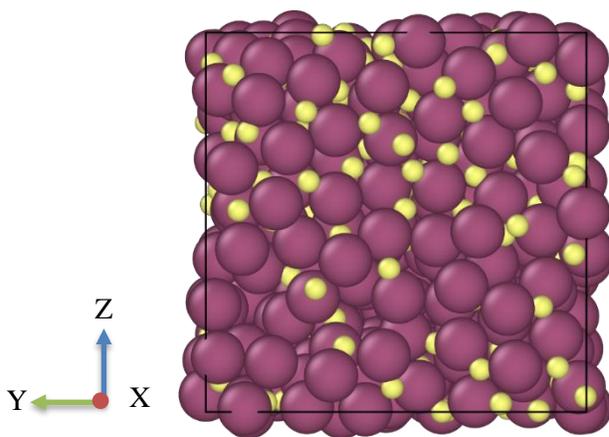


Figura 24. Perspectiva de una película de Al_2O_3 , donde los átomos morados son aluminio y los átomos amarillos son oxígeno.

En la figura 25 podemos observar que los átomos de aluminio y oxígeno vibran con el aumento de la temperatura.

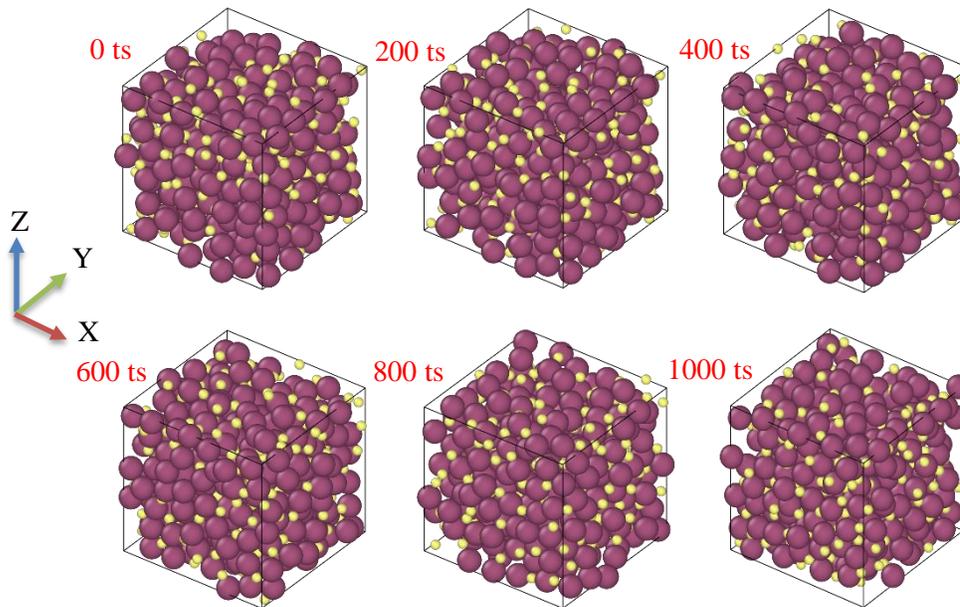


Figura 25. Comportamiento de la película de Al_2O_3 , donde los átomos morados son aluminio y los átomos amarillos son oxígeno.

4.5.4 Simulación de una película de Ga_2O_3

Al finalizar la simulación se crearon 2400 átomos, de los cuales 400 corresponden al grupo gfree y 2200 al grupo mobile; la longitud de la caja fue de 56.5, 56.5 y 56.5 para X, Y, Z respectivamente.

Al igual que el script de Al_2O_3 , las condiciones termodinámicas declaradas para este script fue un ensamble canónico en el cual se crearon las mismas rampas de temperaturas presentadas en la gráfica 1. Los pasos de tiempo para realizar todo el proceso fueron 28,000 los cuales se dividieron en cada una de las rampas.

Las interacciones fueron logradas gracias al potencial de Tersoff para el Ga_2O_3 , con el cual se puede dar la certeza que las interacciones entre los átomos son realistas o cercanas a la realidad. En la figura 26 podemos observar cómo los átomos de oxígeno se depositan en el sustrato de GaAs para así formar una película de Ga_2O_3 .

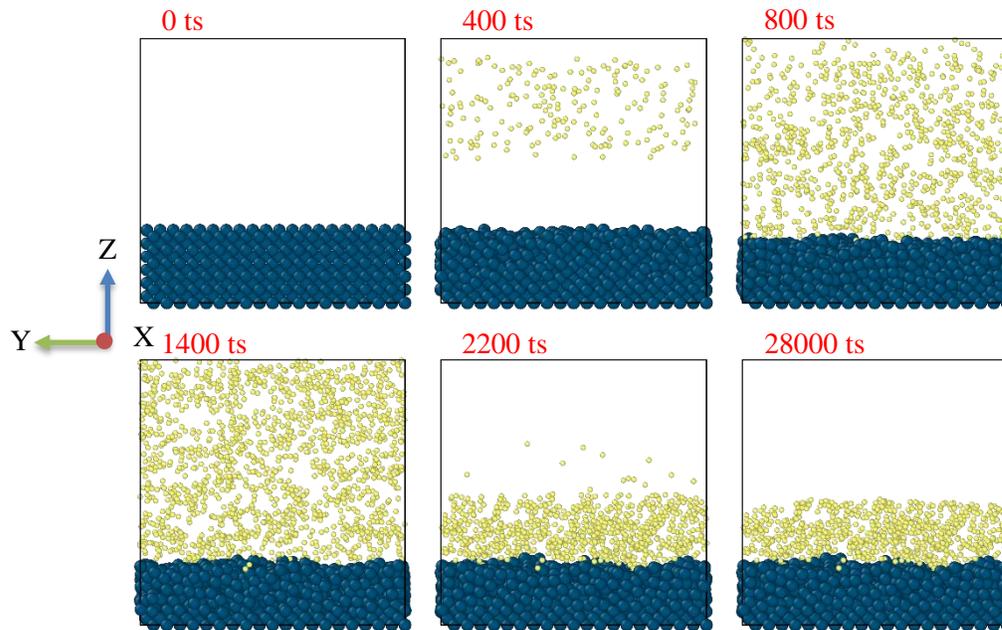


Figura 26. . Comportamiento de la película de Ga_2O_3 , donde los átomos azules son arseniuro de galio y los átomos amarillos son oxígeno

En la figura 27, se puede observar los enlaces que se crean entre el sustrato de galio con los átomos de oxígeno.

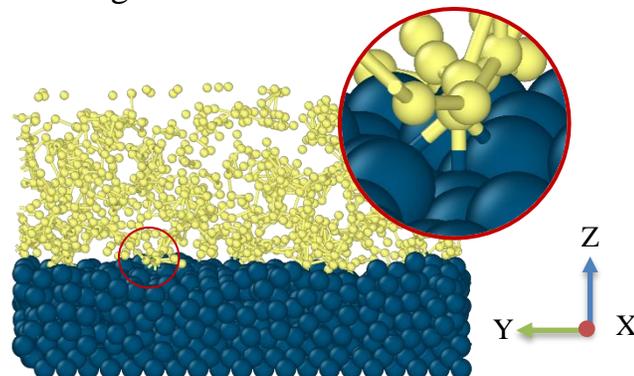


Figura 27. Enlaces creados entre los átomos de galio y oxígeno

Para lograr una comparación entre los resultados experimentales y de simulación, fue necesario utilizar resultados de Microscopio de Fuerza Atómica (MFA) realizados por la Mtra. Giselle Brenes [56], quien es alumna titulada del Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables.

En la figura 28 se puede observar la porosidad de la película teniendo granos y cúmulos; de igual manera, se puede observar una sección con menor porosidad y mejor compactación al sustrato. El equipo que se utilizó fue un MFA de Park Systems, modelo XE7. Las mediciones se hicieron en modo no contacto en un área de $5 \times 5 \mu\text{m}$.

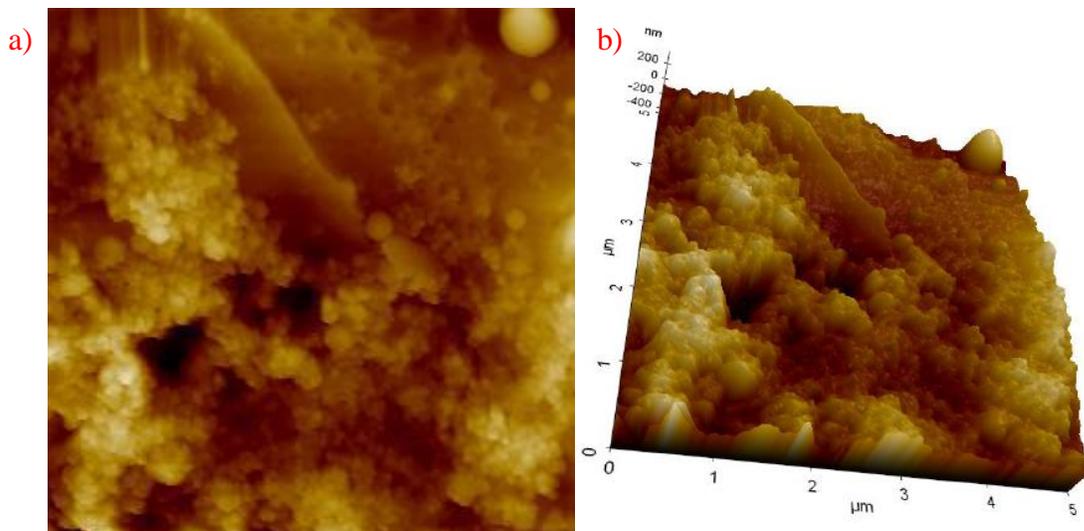


Figura 28. Resultados de MFA donde a) es una vista superior y b) es una vista ortogonal.

En Ovito se realizaron arreglos como una malla superficial y una construcción de malla para así obtener una imagen comparativa con los resultados del MFA. En la figura 29 se puede observar el resultado de los arreglos previamente mencionados.

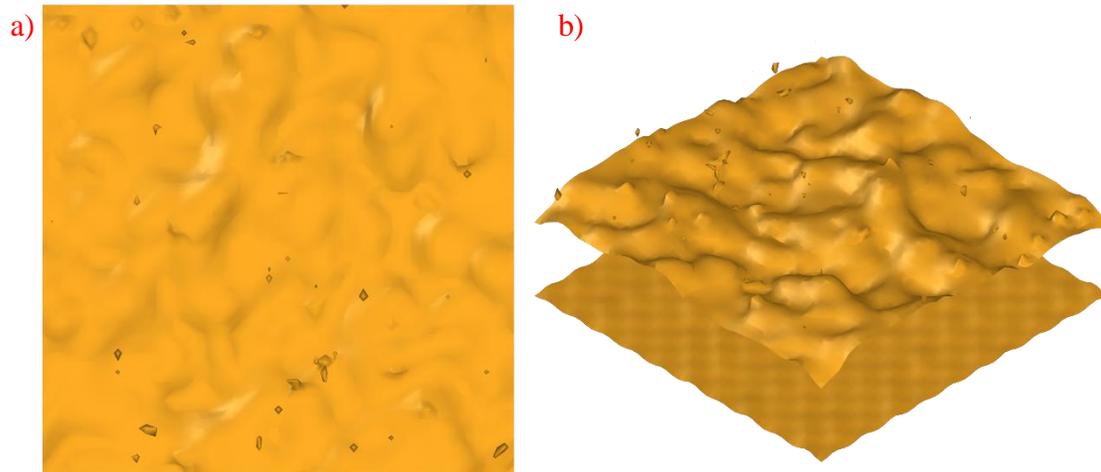


Figura 29. Malla superficial de la simulación de Ga₂O₃ donde a) es una vista superior y b) es una vista ortogonal.

Como se puede observar, en ambos resultados se presenta porosidad; es decir, en ambos resultados se logra visualizar granos y cúmulos sobre la superficie del sustrato. Este resultado demuestra que a través de modelación computacional es posible obtener similares a los experimentales; no solo en estructura cristalina sino también en la morfología superficial.

CAPÍTULO V CONCLUSIONES

Este trabajo de investigación fue de suma importancia debido a que el Ga_2O_3 es un material que se sintetiza fácilmente sin ser impurificado; además, tiene costos de producción menores en comparación con otras técnicas de síntesis.

Se realizaron un total de 8 síntesis mediante la técnica de oxidación térmica controlada y se logró obtener películas nanoestructuradas de $\beta\text{-Ga}_2\text{O}_3$.

Se estudió de la morfología y estructura de los sustratos obtenidos, los resultados permitieron calcular el tamaño de cristal, el cual presenta valores de 11.05 y 13.23 nm; por otro lado, el diámetro de poro obtenido es de ~61 nm.

Los espectrofotómetros presentados muestran cambios en el azul de metileno, por lo tanto, indican que las muestras lograron tener una actividad para fotodegradación cuando son expuestas a la luz ultravioleta.

Se logró simular GaAs con las orientaciones (1 0 0) y (1 1 1). Esta simulación presenta secuencias de apilamiento correspondientes a la estructura cristalina cúbica del material.

La película obtenida a través de LAMMPS de Ga_2O_3 presenta una estructura policristalina. En este script se crearon 2,400 átomos y se logró representar el proceso de depósito que se lleva de forma experimental.

5.1 Trabajos a futuro

- Pruebas de fotodegradación con agua de ríos contaminados.
- Pruebas de efecto fotocatalítico de las nanoestructuras de Ga_2O_3 sobre sustratos de Silicio y Zafiro.
- Mejora de la cámara de reacciones con materiales más sofisticados para incrementar la eficiencia de degradación.
- Crear modelos para Ga_2O_3 con diferentes sustratos.
- Estudiar las propiedades eléctricas y térmicas del Ga_2O_3 .

REFERENCIAS

- [1] V. Fiorentini y G. Gulleri, «Theoretical Evaluation of Zirconia and Hafnia as Gate Oxides for Si Microelectronics,» *Physical Review Letters*, vol. 89, n° 26, p. 266101, 2002.
- [2] L. Cattin, M. Morsli, F. Dahou, S. Abe, A. Khelil y J. Bernède, «Investigation of Low Resistance Transparent MoO₃/Ag/MoO₃ Multilayer and Application as Anode in Organic Solar Cells,» *Thin Solid Films*, vol. 518, n° 16, pp. 4560 - 4563, 2010.
- [3] Y. Kokubun, K. Miura, F. Endo y S. Nakagomi, «Sol-gel Prepared β -Ga₂O₃ Thin Films for Ultraviolet Photodetectors,» *Applied Physics Letters*, vol. 90, n° 3, p. 031912, 2007.
- [4] S. Stepanov, V. Nikolaev, V. Bougrov y A. Romanov, «Gallium Oxide: Properties and Applications - A review,» *Rev. Adv. Mater. Sci.*, vol. 44, pp. 63-86, 2016.
- [5] C. Yeh, Y. Zhao, H. Li, F. P. Yu, S. Zhang y D. S. Wu, «Growth and Photocatalytic Properties of Gallium Oxide Films Using Chemical Bath Deposition,» *Crystals*, vol. 9, n° 11, p. 564, 2019.
- [6] K. Nakagawa, C. Kajita, K. Okumura, N. O. Ikenaga, M. Nishitani-Gamo, T. Ando, T. Kobayashi y T. Suzuki, «Role of Carbon Dioxide in the Dehydrogenation of Ethane over Gallium-Loaded Catalyst,» *Journal of Catalysis*, vol. 203, n° 1, pp. 87-93, 2001.
- [7] L. Guzmán, «Síntesis y Caracterización de Películas Delgadas de Óxido de Galio (Ga₂O₃) Nanoestructurado para el Desarrollo de Sensores de Gas,» de *Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas*, Tuxtla Guitérrez, 2017.

- [8] T. Minami, Y. Nishi y T. Miyata, «High-efficiency Cu₂O-based Heterojunction Solar Cells Fabricated Using a Ga₂O₃ Thin Film as N-type Layer,» *Applied Physics Express*, vol. 6, nº 4, p. 044101, 2013.
- [9] I. López, *Propiedades Físicas y Dopado de Nanoestructuras de Óxido de Galio*, Madrid: Universidad Complutense de Madrid, 2014.
- [10] Y. Tomm, P. Reiche, D. Klimm y T. Fakuda, «Czochralski Grown Ga₂O₃ Crystals,» *Journal of Crystal Growth*, vol. 220, nº 4, pp. 510-514, 2000.
- [11] S. Ohira, N. Suzuki, M. Arai, T. Tanaka, K. Sugawara, Nakajima y T. Shishido, «Characterization of Transparent and Conducting Sn-doped β-Ga₂O₃ Single Crystal After Annealing,» *Thin Solid Films*, vol. 516, nº 17, pp. 5763-5767, 2008.
- [12] A. Kuramata, K. Koshi, S. Watanabe, T. Yamaoka, Masui y S. Yamakoshi, «Defect Characterization of Ga₂O₃ Single Crystals Grown by Vertical Bridgman Method,» *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 55, nº 12, p. 1202BF, 2016.
- [13] M. Higashiwaki, H. Murakami, Kumagai y A. Kuramara, «Current Status of Ga₂O₃ Power Devices,» *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 55, nº 12, p. 1202A1, 2016.
- [14] ONU, «Informe de Brudland,» Nueva York, 1987.
- [15] D. Chen y A. K. Ray, «Photodegradation Kinetics of 4-Nitrophenol in TiO₂ Suspension,» *Water Research*, vol. 32, nº 11, pp. 3223-3234, 1998.
- [16] Y. Hou, L. Wu, X. Wang y Z. & F. X. Ding, «Photocatalytic Performance of α-, β-, and γ-Ga₂O₃ for the Destruction of Volatile Aromatic Pollutans in Air,» *Journal of Catalysis*, vol. 250, nº 1, pp. 12-18, 2007.

- [17] B. Zhao y P. Zhang, «Photocatalytic Decomposition of Perfluorooctanoic Acid with β -Ga₂O₃ Wide Bandgap Photocatalyst,» *Catalysis Communications*, vol. 10, n° 8, pp. 1184-1187, 2009.
- [18] Y. Hou, J. Zhang, Z. Ding y L. Wu, «Synthesis, Characterization and Photocatalytic Activity of β -Ga₂O₃ Nanostructures,» *Powder Technology*, vol. 203, n° 3, pp. 440-4460, 2010.
- [19] Y. Sakata, Y. Matsuda, T. Nakagawa, R. Yasunaga, H. Imamura y K. Teramira, «Remarkable Improvement of the Photocatalytic Activity of Ga₂O₃ Toward the Overall Splitting of H₂O,» *ChemSusChem*, vol. 4, n° 2, pp. 181-184, 2011.
- [20] S. Jin, X. Wang, M. Ju, S. Shen, W. Liang, Y. Zhao y C. Li, «Effect of Phase Junction Structure on the Photocatalytic Performance in Overall Water Splitting: Ga₂O₃ as an Example,» *The Journal of Physical Chemistry C*, vol. 119, n° 32, pp. 18221-18228, 2015.
- [21] J. Müller, B. Rech, J. Springer y M. Vanecek, «TCO and Light Trapping in Silicon Thin Film Solar Cells,» *Solar Energy*, vol. 77, n° 6, pp. 917-930, 2004.
- [22] R. Tang, X. Wang, W. Lian, J. Huang, Q. Wei, M. Huang, Y. Yin, C. Jiang, S. Yang, G. Xing, S. Chen, C. Zhu, X. Hao, M. A. Green y T. Chen, «Hydrothermal Deposition of Antimony Selenosulfide Thin Films Enables Solar Cells with 10% Efficiency,» *Nature Energy*, vol. 5, n° 8, pp. 587-595, 2020.
- [23] M. R. Islam, M. Rahman, S. F. U. Farhad y J. Podder, «Structural, Optical and Photocatalysis Properties of Sol–gel Deposited Al-doped ZnO Thin Films,» *Surfaces and Interfaces*, vol. 16, pp. 120-126, 2019.
- [24] Z. Feng, A. F. M. Anhar Uddin Bhuiyan, M. R. Karim y M. Zhao, «MOCVD Homoepitaxy of Si-doped (010) β -Ga₂O₃ Thin Films with Superior Transport Properties,» *Applied Physics Letters*, vol. 114, n° 25, p. 250601, 2019.

- [25] A. Sharmin, S. Tabassum, M. S. Bashar y Z. H. Mahmood, «Depositions and Characterization of Sol–gel Processed Al-doped ZnO (AZO) as Transparent Conducting Oxide (TCO) for Solar Cell Application,» *Journal of Theoretical and Applied Physics*, vol. 13, n° 2, pp. 123-132, 2019.
- [26] X. Zhang, L. Li, J. Su, Y. Wang, Y. Shi, X. Ren y Y. Gao, «Bandgap Engineering of $GaxZn_{1-x}O$ Nanowire Arrays for Wavelength-tunable Light-emitting Diodes,» *Laser & Photonics Reviews*, vol. 8, n° 3, pp. 429-435, 2014.
- [27] A. Stadler, «Transparent Conducting Oxides - An Up-to-date Overview,» *Materials*, vol. 5, n° 12, pp. 661-683, 2012.
- [28] L. Zhang, J. Yan, Y. Zhang, T. Li y X. Ding, «First-principles Study on Electronic Structure and Optical Properties of N-doped P-type β -Ga₂O₃,» *Science China Physics, Mechanics and Astronomy*, vol. 55, n° 1, pp. 19-24, 2012.
- [29] H. Peelaers y C. G. Van de Walle, «Brillouin Zone and Band Structure of β -Ga₂O₃,» *Physica Status Solidi*, vol. 252, n° 4, pp. 828-832, 2015.
- [30] S. J. Pearton, J. Yang, P. H. Cary IV, F. Ren, J. Kim, M. J. Tadjer y M. A. Mastro, «A Review of Ga₂O₃ Materials, Processing, and Devices,» *Applied Physics Reviews*, vol. 5, n° 1, p. 011301, 2018.
- [31] H. Masataka, K. Akito, M. Hisashi y K. Yoshinao, «State of the Art Technologies of Gallium Oxide Power Devices,» *Journal Physics*, vol. 50, n° 33, p. 333002, 2017.
- [32] O. M. Bordun, B. O. Bordun, I. Y. Kukharskyy y I. I. Medvid, «Photoluminescence Properties of β -Ga₂O₃ Thin Films Produced by Ion-plasma Sputtering,» *Journal Applied Spectroscopy*, vol. 84, n° 1, pp. 46-51, 2017.
- [33] H. He, R. Orlando, M. A. Blanco, R. Pandey, E. Amzallag, I. Baraille y M. Rérat, «First-principles Study of the Structural, Electronic, and

Optical Properties of Ga₂O₃ in its Monoclinic and Hexagonal Phases,» *Physical Review B*, vol. 74, n° 19, p. 195123, 2006.

- [34] H. Zhou, J. Zhang, C. Zhang, Q. Feng, S. Zhao, P. Ma y Y. Hao, «A Review of the Most Recent Progresses of State-of-Art Gallium Oxide Power Devices,» *Journal of Semiconductors*, vol. 40, n° 1, p. 011803, 2019.
- [35] M. Orita, H. Ohta, M. Hirano y H. Hosono, «Deep-ultraviolet Transparent Conductive β -Ga₂O₃ Thin Films,» *Applied Physics Letters*, vol. 77, n° 25, pp. 4166-4168, 2000.
- [36] T. Onuma, S. Saito, K. Sasaki, T. Masui, T. Yamaguchi, T. Honda y M. Higashiwaki, «Valence Band Ordering in β -Ga₂O₃ Studied by Polarized Transmittance and Reflectance Spectroscopy,» *Japanese Journal of Applied Physics*, vol. 54, n° 11, p. 112601, 2015.
- [37] M. Higashiwaki y G. H. Jessen, «Guest Editorial: The dawn of gallium oxide microelectronics,» *Applied Physics Letters*, vol. 112, p. 060401, 2018.
- [38] V. Arribas, «Formación de Nanoestructuras de Silicio por Evaporación Térmica y Pulverización Catódica.,» Bellatera, 2012.
- [39] P. Vicente, «Síntesis en Masa de Óxido de Zinc por Descarga de Arco y su Procesamiento por Oxidación Térmica para Obtener Diferentes Nanoestructuras.,» Puebla, 2016.
- [40] T. González, «Diseño de Potenciales Externos para Inducir el Plegamiento de Proteínas en Dinámica Molecular.,» Ciudad de México., 2017.
- [41] T. Hansson, C. Oostenbrink y W. Van Gunsteren, «Molecular Dynamics Simulations,» *Current Opinion in Structural Biology*, vol. 12, n° 2, pp. 190-196, 2002.

- [42] B. Leimkuhler y C. Matthews, *Molecular Dynamics*, Suiza: Springer International PU, 2016.
- [43] C. Torres, «SciELO,» UNAM, Enero 2017. [En línea]. Available: www.scielo.org.mx. [Último acceso: 28 Enero 2020].
- [44] K. Prübner, K. Pingel, H. Dressel, J. Becker, C. Reinart, M. Schlossers y H. Christ, «La Enseñanza de Técnicas de Caracterización de Materiales: Un Método Interdisciplinario para Desarrollar Software Interactivo Multimedia para la Enseñanza/Aprendizaje Basado en la Red.,» *Journal of Materials Education*, vol. 23, n° 1-3, pp. 105-111, 2011.
- [45] M. Arizaga, C. Aparicio y G. Carbajal, «Utilidad de la Difracción de Rayos X en las Nanociencias,» *Mundo Nano. Revista Interdisciplinaria en Nanociencias y Nanotecnología*, vol. 3, n° 2, 2015.
- [46] F. T. Vázquez, «X ray diffraction. Applications to construction quality control.,» *Materiales de Construcción*, vol. 24, n° 155, pp. 63-84, 1974.
- [47] Y. Leng, *Materials Characterization: Introduction to Microscopic and Spectroscopic Methods*, John Wiley & Sons, 2009.
- [48] J. Renau-Piqueras y M. Faura, «Principios Básicos del Microscopio Electrónico de Barrido,» 1994.
- [49] Universidad de Alicante, «Espectroscopía Ultravioleta Visible,» 20 Diciembre 2018. [En línea]. Available: <https://ssti.ua.es>. [Último acceso: 16 Noviembre 2020].
- [50] E. M. García, «Aplicación de la Ley de Lambert-Beer en Espectroscopía UV-visible,» Universidad Politecnica de Valencia, 9 Junio 2012. [En línea]. Available: <http://hdl.handle.net/10251/16360>. [Último acceso: 14 Marzo 2021].
- [51] A. C. Alvarado y B. A. Florencia, «Implementación de un Sistema de Detección y Medición de Turbiedad del Agua Usando Fibra Óptica,» *Espol*, 2018.

- [52] X. Niu, W. Yan, C. Shao, H. Zhao y J. Yang, «Hydrothermal Synthesis of Mo-C Co-Doped TiO₂ and Coupled with Fluorine-Doped Tin Oxide (FTO) for High-Efficiency Photodegradation of Methylene Blue and Tetracycline: Effect of Donor-Acceptor Passivated Co-Doping,» *Applied Surface Science*, vol. 466, pp. 882-892, 2019.
- [53] S. Silvestri, J. F. De Olivera y E. L. Foletto, «Degradation of Methylene Blue Using Zn₂SnO₄ Catalysts Prepared with Pore-Forming Agents,» *Materials Research Bulletin*, vol. 117, pp. 56-62, 2019.
- [54] C. A. Camas Flores, J. E. Conde Díaz, M. Á. Vidal y H. Vilchis Bravo, «Molecular Dynamics Simulation of Cubic In_xGa_(1-x)N Layers Growth by Molecular Beam Epitaxy,» *Computational Materials Science*, vol. 193, p. 110387, 2021.
- [55] K. Ioannis, Molecular Dynamics Investigation of GaN Nanocluster Formation in Amorphous SiO₂ Matrix, Salónica: Universidad Aristóteles de Salónica, 2016.
- [56] G. Hernández Brenes, Síntesis y Caracterización de Películas Delgadas de Óxido de Galio (Ga₂O₃) Nanoestructurado Mediante Spin Coating, Tuxtla Gutiérrez: Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas, 2018.

ANEXOS

Anexo A: Script del Sustrato GaAs (1 0 0)

```
#-----Initialize Simulation-----
units          metal
dimension      3
boundary       p p p
atom_style     atomic
variable       a equal 5.65          #---En Angstroms---

#-----Create Atoms-----
region         one block 0 20 0 20 0 50
create_box    2 one

lattice        custom $a &
              a1 1.0 0.0 0.0      &
              a2 0.0 1.0 0.0      &
              a3 0.0 0.0 1.0      &
              basis 0.0 0.0 0.0    &
              basis 0.0 0.5 0.5    &
              basis 0.5 0.0 0.5    &
              basis 0.5 0.5 0.0    &
              basis 0.25 0.25 0.25 &
              basis 0.25 0.75 0.75 &
              basis 0.75 0.25 0.75 &
              basis 0.75 0.75 0.25 &
              orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
create_atoms  1 region one basis 5 2 basis 6 2 basis 7 2 basis 8 2

#-----Define Atoms-----
```

```

mass 1 69.723
mass 2 74.921
group Ga type 1
group As type 2

#-----Interatomic Potential-----
pair_style tersoff
pair_coeff * * GaAs.tersoff Ga As

#-----Settings-----
compute eng all pe/atom
compute eatoms all reduce sum c_eng

#-----Run Minimization-----
reset_timestep 0
write_dump      all atom dump.GaAs100
thermo 10
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz c_eatoms
min_style cg

#-----Simulation Done-----
print "All done"

```

Anexo B: Script del Sustrato GaAs (1 1 1)

```
#-----Initialize Simulation-----
units          metal
dimension      3
boundary       p p p
atom_style     atomic
variable       a equal 5.65          #---En Angstroms---

#-----Create Atoms-----
region         one block 0 20 0 20 0 50
create_box     2 one

lattice        custom $a &
              a1 1.0 0.0 0.0      &
              a2 0.0 1.0 0.0      &
              a3 0.0 0.0 1.0      &
              basis 0.0 0.0 0.0    &
              basis 0.0 0.5 0.5    &
              basis 0.5 0.0 0.5    &
              basis 0.5 0.5 0.0    &
              basis 0.25 0.25 0.25 &
              basis 0.25 0.75 0.75 &
              basis 0.75 0.25 0.75 &
              basis 0.75 0.75 0.25 &
              orient x -2 1 1 orient y 0 -1 1 orient z 1 1 1
create_atoms 1 region one basis 5 2 basis 6 2 basis 7 2 basis 8 2

#-----Define Atoms-----
mass 1 69.723
mass 2 74.921
group Ga type 1
```

```
group As type 2
```

```
#-----Interatomic Potential-----
```

```
pair_style tersoff
```

```
pair_coeff * * GaAs.tersoff Ga As
```

```
#-----Settings-----
```

```
compute eng all pe/atom
```

```
compute eatoms all reduce sum c_eng
```

```
#-----Run Minimization-----
```

```
reset_timestep 0
```

```
write_dump      all atom dump.GaAs111
```

```
thermo 10
```

```
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz c_eatoms
```

```
min_style cg
```

```
#-----Simulation Done-----
```

```
print "All done"
```

Anexo C: Script del Depósito de Al₂O₃

```
#----- Initialize Simulation -----
clear
units          metal
dimension      3
boundary       p p p
atom_style     atomic
variable       a equal 4.78

#----- Create Atoms -----
region         one block 0 20 0 20 0 20
create_box     2 one
lattice        custom $a &
               a1 1.0 0.0 0.0      &
               a2 0.0 1.0 0.0      &
               a3 0.0 0.0 1.0      &
               basis 0.0 0.0 0.0    &
               basis 0.0 0.5 0.5    &
               basis 0.5 0.0 0.5    &
               basis 0.5 0.5 0.0    &
               basis 0.25 0.25 0.25 &
               basis 0.25 0.75 0.75 &
               basis 0.75 0.25 0.75 &
               basis 0.75 0.75 0.25 &
               orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
region         Aluminio  block 0 20 0 20 0 10 units box
region         Oxigeno  block 0 20 0 20 10 20  units box
create_atoms   2 region Aluminio
create_atoms   1 region Oxigeno
group          Aluminio  region  Aluminio
group          Oxigeno   region  Oxigeno
```

```

group      AlO      union      Aluminio Oxigeno

#-----Define Atoms-----
mass 1 15.999      #O
mass 2 26.9815    #Al
group 0 type 1
group Al type 2

#-----Define Interatomic Potential-----
pair_style eam/alloy
pair_coeff * * AlO.eam.alloy O Al
neighbor 2.0 bin
neigh_modify delay 1 check yes

#-----Define Settings-----
compute eng all pe/atom
compute eatoms all reduce sum c_eng
thermo 10
thermo_style custom step pe lx ly lz press pxx pyy pzz c_eatoms
min_style cg
minimize 1e-8 1e-8 1000 1000
dump      dump1 all custom 100 AlO.dump id type x y z

# ----- Run Minimization -----
reset_timestep 0
velocity      AlO create 480 39849 mom yes rot yes dist gaussian
fix          1 AlO nvt temp 480 680 10 drag 0.0
run 1000
#-----Simulation Done-----
print "All done"

```

Anexo D: Script del Depósito de Ga₂O₃

```
#----- Initialize Simulation -----
units          metal
dimension      3
boundary       p p f
atom_style     atomic

#----- Create Atoms -----
variable  a equal 5.65  &
          a4 equal ${a}/4
          a19_4 equal 9*${a}/4
          x_dim equal 10*${a}
          y_dim equal 10*${a}
          z_dim equal 10*${a}
          z_dim3 equal 3*${a}
          zsuplo equal ${z_dim3}-${a}/2
          z3_dim equal ${z_dim}/3
          adz_lo equal ${z_dim}-${a}
          adz_hi equal ${z_dim}-${a}/2
region      espacio_sim block 0.0 ${x_dim} 0.0 ${y_dim} 0.0 ${z_dim}
units box
create_box 2 espacio_sim

lattice    custom $a &
          a1 1.0 0.0 0.0    &
          a2 0.0 1.0 0.0    &
          a3 0.0 0.0 1.0    &
          basis 0.0 0.0 0.0  &
          basis 0.0 0.5 0.5  &
          basis 0.5 0.0 0.5  &
          basis 0.5 0.5 0.0  &
```

```

basis 0.25 0.25 0.25 &
basis 0.25 0.75 0.75 &
basis 0.75 0.25 0.75 &
basis 0.75 0.75 0.25 &
orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
region sustrato block 0.0 ${x_dim} 0.0 ${y_dim} 0.0 ${z_dim3}
units box
create_atoms 2 region sustrato
region adatomos block 2.0 ${x_dim} 2.0 ${y_dim} ${adz_lo}
${adz_hi} units box

region estatico block INF INF INF INF INF ${a4} units box
region bt block INF INF INF INF ${a4} ${a19_4} units box
region superfblock INF INF INF INF ${a19_4} ${z_dim3} units
box

group gadat type 1
group gestatic region estatico
group gbt region bt
group gsuperfblock region superfblock
group gsust union gestatic gbt gsuperfblock
group gfree subtract all gbt gestatic
group mobile union gbt gfree

#-----Define Atoms-----
mass 1 15.999 # oxigeno
mass 2 69.723 # galio

#-----Define Interatomic Potential-----
pair_style tersoff
pair_coeff * * Ga203.tersoff 0 Ga

```

```

neighbor      2.0 bin
neigh_modify  delay 1 check yes

#-----Define Settings-----
dump          dump1 all custom 100 Ga203_P1.dump id type x y z
reset_timestep 0
thermo        1000
thermo_style  custom step pe ke etotal temp vol press

compute       adat_temp gadat temp
compute_modify adat_temp dynamic/dof yes extra/dof 0
compute thickness  gadat chunk/atom type
fix           1 gestatic setforce 0.0 0.0 0.0

#----- Run Minimization -----
min_style     cg
minimize      1e-8 1e-8 1000 1000
timestep      0.001

velocity      gfree create 1153 39849 mom yes rot yes dist gaussian
fix          2 gbt nvt temp 473 673 10 drag 0.0
fix          temp_rescale gbt temp/rescale 200 473 673 1.0 1.0
run          1000 #pasos de tiempo ejemplo
unfix       2

fix          3 gbt nvt temp 673 673 10 drag 0.0
fix          temp_rescale gbt temp/rescale 200 673 673 1.0 1.0
run          2000
unfix       3

fix          4 gbt nvt temp 673 1153 10 drag 0.0

```

```
fix          temp_rescale gbt temp/rescale 200 473 1153 1.0 1.0
run          2000
unfix       4

fix          5      gbt nvt temp 1153 1153 10 drag 0.0
fix          temp_rescale gbt temp/rescale 200 1153 1153 1.0 1.0
fix          6 gfree nve
fix          7 gfree deposit 5000 1 10 95485 region adatomos near 1.2
vz -10.9 -10.9 units box
fix          8 all wall/reflect zhi EDGE
thermo_modify  lost ignore flush yes
run          3000
unfix       5

fix          9      gbt nvt temp 1153 300 10 drag 0.0
fix          temp_rescale gbt temp/rescale 200 1153 300 1.0 1.0
run          20000

#-----Simulation Done-----
print       "All Done"
```

Anexo E: Productividad Académica

1. Asistencia al “International Material & System Congress for Renewable Energy Applications (IMSCREA 2017)”. Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 15 – 18 de agosto de 2017.



2. Asistencia a la “XI Cátedra Nacional de Química CUMex 2017: Dr. Mario Molina Henríquez”. Universidad de Ciencias y Artes Chiapas y el Consorcio de Universidades Mexicanas. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 20 de octubre de 2017.



XI CÁTEDRA NACIONAL DE QUÍMICA
"MARIO MOLINA HENRIQUEZ"

LA UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS
Y
EL CONSORCIO DE UNIVERSIDADES MEXICANAS

Otorgan

CONSTANCIA

A

ANA LILIA MELCHOR TOVILLA

Por su participación en la
XI Cátedra Nacional de Química CUMex 2017
Dr. Mario Molina Henríquez
Retos y desafíos de la Química Ambiental para la Sustentabilidad
realizado del 19 al 20 de octubre de 2017,
con una duración de 20 horas, en la Facultad de Ingeniería en Ciudad Universitaria.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; a 20 de octubre de 2017.


Dr. Javier Saldana Almazán
Rector de la Universidad Autónoma de Guerrero
y Presidente del CUMex


Dra. Berenice Illades Aguiar
Coordinadora de las
Cátedras Nacionales CUMex


Dra. Flor Marina Bermúdez Urbina
Secretaría Académica
de la UNICACH


Dr. Roberto Horacio Albores Arzate
Director de la Facultad de Ingeniería
de la UNICACH



3. Participación en el taller “Comprensión Lectora en Hábitos de Estudios”.
Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas;
México. 17 de noviembre de 2017.

LA SECRETARÍA ACADÉMICA DE LA
UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS

Otorga

CONSTANCIA

A

Ana Lilia Melchor Tovilla

Por su participación en el Taller
Comprensión lectora en hábitos de estudios
realizado el 17 de noviembre de 2017,
con una duración de 06 horas,
en el Instituto de Ciencias Básicas y Aplicadas,
en Ciudad Universitaria.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; a 17 de noviembre de 2017.

“Por la Cultura de mi Raza”



Dra. Flor Marina Bermúdez Urbina
Secretaria Académica



4. Diploma por conclusión del Proyecto Especial Sabatino de Inglés para Certificación (PESIC). Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 29 de agosto de 2018.



LA UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS
a través del
Programa Infantil Chiapaneco de Inglés
del Centro de Lenguas de la Facultad de Humanidades



otorga el presente

DIPLOMA

a:

Ana Lilia Melchor Tovilla

Por haber concluido satisfactoriamente todos los niveles (A1-C1)
del Proyecto Especial Sabatino de Inglés para Certificación

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; 29 de agosto de 2018


Dr. José Rodolfo Calvo Fonseca
Rector

Programa Infantil Chiapaneco de Inglés
FACULTAD DE HUMANIDADES

5. Diploma como becaria otorgado por la Fundación Telmex Telcel. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. Octubre 2018.



6. Participación en el curso “Metodología de la Investigación” en el marco del proyecto “Fomento a las Vocaciones Científicas y de Innovación Tecnológica entre Jóvenes Estudiantes del Estado de Chiapas”. Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 5 – 9 de noviembre de 2018.



UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS

otorga

CONSTANCIA

a

Ana Lilia Melchor Tovilla

Por su participación en el curso "Metodología de la Investigación" en el marco del proyecto "Fomento a las Vocaciones Científicas y de Innovación Tecnológica entre jóvenes Estudiantes del Estado de Chiapas" apoyado por el CONACyT, del 05 al 09 de noviembre del presente.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; Noviembre de 2018

Por la Cultura de mi Raza

Dra. Magnolia Solís López
Directora de Investigación y Posgrado



DIRECCION DE INVESTIGACION
Y POSGRADO

7. Constancia por aprovechamiento como mejor promedio. Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables, Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 5 de abril de 2019.

EL INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN EN ENERGÍAS RENOVABLES
UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS

Otorga
CONSTANCIA

A

C. Melchor Tovilla Ana Lilia

Por su aprovechamiento y obtener el mejor promedio de 9.28 en el ciclo escolar Agosto – Diciembre 2018

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; a 05 de abril, 2019.

Por la cultura de mi raza




Dra. Edna Iris Ríos Valdovinos
Coordinadora del P.E.I.E.R.



Instituto de Investigación
e Innovación en
Energías Renovables


Dr. Pascual López De Paz
Director del IIER

8. Constancia por participación en la “Universiada Nacional 2019” en la categoría de atletismo, fase estatal. Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables, Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 5 de abril de 2019.



9. Participación en el “Primer Festival Internacional y Encuentro para la Acción Climática de los Jóvenes”. Consejo Empresarial para la Productividad y el Centro de Investigación y Estudios del Sector Privado. San Cristóbal de Las Casas, Chiapas; México. 15 – 16 de mayo de 2019.



THE PROTECT OUR PLANET MOVEMENT,
EL CONSEJO EMPRESARIAL PARA LA PRODUCTIVIDAD Y EL
CENTRO DE INVESTIGACIÓN Y ESTUDIOS DEL SECTOR PRIVADO
OTORGA LA PRESENTE

CONSTANCIA

Ana Lilia Melchor Tovilla

Por su asistencia en el **Primer Festival Internacional y Encuentro para la Acción Climática de los Jóvenes 2019**, realizado los días 15 y 16 de mayo del 2019 en las instalaciones del Centro Cultural del Carmen ubicado en San Cristóbal de las Casas, Chiapas, México.

DR. ENRIQUE ALBERTO VAZQUEZ CONSTANTINO
Presidente del Centro de Investigación y
Estudios Sociales, Económicos y de Mercados
Del Sector Privado.

MTRA. SANDRA DE JESUS LÓPEZ RUIZ.
Presidente del Corporativo Enlamarket y
Asesores en Soluciones de Negocios S.C



10. Entrevista en la Radio Universidad, 102.5 UNICACH FM. Tuxtla Gutiérrez; Chiapas. 20 de mayo del 2019.



11. Reconocimiento por participar en la “Feria del Emprendimiento Ambiental”. Ayuntamiento Municipal. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 4 de junio de 2019.



12 Participación con el proyecto “Photodegradation of Methylene Blue Based on Thin Films of Gallium Oxide” en la modalidad póster en el XXVIII International Material Research Congress. Sociedad Mexicana de Materiales, A. C. Cancún Quintana Roo, México. 18 – 23 de agosto de 2019.



Sociedad Mexicana
de Materiales A.C.

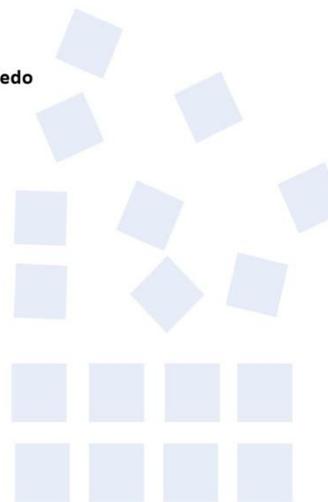
August 2021

TO WHOM IT MAY CONCERN
P r e s e n t

This is to certify that *Ana Lilia Melchor Tovilla, Elienai Cruz López, Cesar Augusto Camas F, María del Rosario Herrera Rivera, Heber Vilchis* presented the contribution: **STUDY OF GALLIUM OXIDE NANOSTRUCTURE FILMS** as **Poster** modality, in the *A6. Advances in Functional Semiconducting Materials* 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



SA6-P075

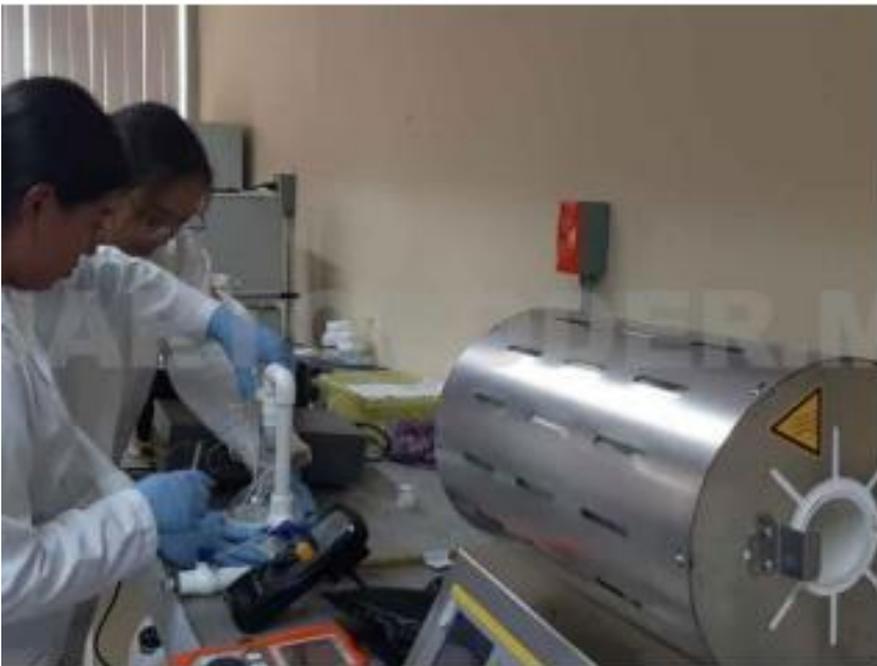
13 Entrevista en el diario Cuarto Poder de Chiapas, Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 15 de octubre de 2019.

Desarrollan proyecto para analizar biogás

Octubre 15

Por: Adolfo Abosaid / Cp

COMPARTIR



Las alumnas de Ingeniería de Energías Renovables de la Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas (Unicach), Elienai Cruz López y Ana Lilia Melchor Tovilla, en coordinación con el investigador Heber Vilchis Bravo, llevan a cabo un proyecto de investigación que consiste en analizar óxido de galio para facilitar la producción de energía eléctrica.

14 Constancia de participación como panelista “Un día sin nosotras”, con motivo de la celebración del Día Internacional de la Mujer. Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables, Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 6 de marzo de 2020.



15 Constancia de asistencia en el “Think Tank Webinar Series: Sistema de Información Geográfica para el Desarrollo Municipal Sostenible. Una Visión desde el Campo de las Energías Renovables”. Universidad Autónoma de Chiapas. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 30 de septiembre de 2020.



La Universidad Autónoma de Chiapas

a través del

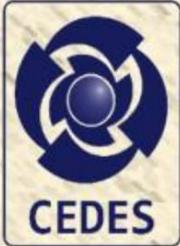
Centro de Estudios para el Desarrollo Municipal y Políticas Públicas

Otorga la presente

CONSTANCIA

A: Ana Lilia Melchor Tovilla

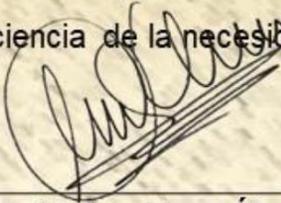
Por su participación como **Asistente** en el Think Tank Webinar Series “Sistema de información geográfica para el desarrollo municipal sostenible. Una visión desde el campo de las energías renovables” impartida por el Dr. Javier Domínguez Bravo en el marco del **XIII Aniversario del CEDES**, el día 30 de septiembre, 2020. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas.



CENTRO DE ESTUDIOS
PARA EL DESARROLLO MUNICIPAL
Y POLÍTICAS PÚBLICAS



“Por la conciencia de la necesidad de servir”



Dra. Andrea Mena Álvarez
Coordinadora General

16 Constancia de participación con el proyecto “Estudio de Películas Nanoestructuradas de Óxido de Galio” en el 8° Congreso de Ingeniería Industrial “La nueva ingeniería industrial...industria 4.0”. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Tepeji del Río de Ocampo, Hidalgo; México. 6 de mayo de 2021.



**La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo
Escuela Superior de Tepeji del Río**

OTORGA LA PRESENTE

CONSTANCIA

A

**ANA LILIA MELCHOR TOVILLA, ELIENAI CRUZ LÓPEZ
CÉSAR AUGUSTO CAMAS FLORES, HÉBER VILCHIS BRAVO**

Por su participación con la presentación oral titulada
"ESTUDIO DE PELÍCULAS NANOESTRUCTURADAS DE ÓXIDO DE GALIO"
en el marco de las actividades del 8° CONGRESO DE INGENIERÍA INDUSTRIAL
titulado ***"La nueva era de ingeniería industrial... industria 4.0"***

ATENTAMENTE

"AMOR. ORDEN Y PROGRESO"

Tepeji del Río de Ocampo, Hidalgo a 6 de mayo del 2021


M.C. Esp. Enrique Espinas
Director



17 Constancia de participación con el proyecto “Diseño y Construcción de Cámara de Censado de Biogás” en el 8° Congreso de Ingeniería Industrial “La nueva ingeniería industrial...industria 4.0”. Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo. Tepeji del Río de Ocampo, Hidalgo; México. 6 de mayo de 2021.



**La Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo
Escuela Superior de Tepeji del Río**

OTORGA LA PRESENTE

CONSTANCIA

A

**ELIENAI CRUZ LÓPEZ, ANA LILIA MELCHOR TOVILLA,
MARÍA DEL ROSARIO HERRERA, HÉBER VILCHIS**

**Por su participación con la presentación oral titulada
*“DISEÑO Y CONSTRUCCIÓN DE CÁMARA
DE SENSADO DE BIOGÁS”***

**en el marco de las actividades del 8° CONGRESO DE INGENIERÍA INDUSTRIAL
titulado *“La nueva era de ingeniería industrial... industria 4.0”***

ATENTAMENTE

“AMOR. ORDEN Y PROGRESO”

Tepeji del Río de Ocampo, Hidalgo a 6 de mayo del 2021

M.C. Esp. Enrique Espinoza Guerrero
Director



18 Entrevista en la revista UNICACH Press. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas;
México. 7 de mayo de 2021

Investigaciones de estudiantes de Energías Renovables destacan a nivel nacional

• UNICACH presente en Congreso de Ingeniería Industrial

170 vistas

07 de Mayo de 2021



Novedosos proyectos de estudiantes del Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables de la Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas (UNICACH) fueron expuestos en el Octavo Congreso de Ingeniería Industrial, realizado por la Universidad Autónoma del Estado de Hidalgo.

La implementación de biodigestores en el ámbito rural e industrial en el sureste mexicano ha crecido notable en la última década. Sin embargo, se desconoce la calidad del biogás que genera. Por ello se desarrolló un dispositivo capaz de monitorearlo y purificarlo.

19 Constancia de conclusión del curso a distancia “Salud Mental Durante la Pandemia”. Secretaría de Salud Federal. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 8 de junio de 2021.



LA SECRETARÍA DE SALUD
A TRAVÉS DE LA DIRECCIÓN GENERAL
DE CALIDAD Y EDUCACIÓN EN SALUD
OTORGA LA PRESENTE

CONSTANCIA

A

Ana Lilia Melchor Tovilla

Por haber concluido satisfactoriamente el Curso a Distancia:

Salud Mental durante la Pandemia COVID-19

con una duración de 8 horas,

obteniendo una Calificación de 92

Se extiende la presente constancia el 08 de junio de 2021

Dr. Raúl Peña Viveros
Director General de Calidad y Edducación en Salud



Folio EDUCADS2020-0027-149674

20 Constancia de asistencia en el 10º Taller de Dinámica Molecular.
Instituto de Ciencias Físicas. Cuernavaca, Morelos; México. 26 – 30 de
julio de 2021.



[Humberto Saint-Martin Posada](mailto:hstmartin@icf.unam.mx)
hstmartin@icf.unam.mx
Tel.: +52.55.56227796

Cuernavaca, Mor., a 20 de agosto de 2021
Asunto: Constancia de participación en el 10º TDM

El Comité Organizador del 10º Taller de Dinámica Molecular extiende la presente

CONSTANCIA DE ASISTENCIA

A, Ana Lilia Melchor Tovilla de Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas, en virtud de haberse presentado a todos los cursos del grupo Avanzados que se impartieron en formato virtual (videoconferencias) del lunes 26 al viernes 30 de julio de 2021, por un total de 40 (cuarenta) horas.

A nombre del C. O.,

Humberto Saint Martin Posada
Investigador Titular C



Campus Morelos UNAM, Cuernavaca, Morelos, México
C. P. 62251 Apartado Postal 48-3

(52)(55) 56227745 (52)(55) 56227746
(52)(777) 3138915

21 Certificado de participación con el proyecto “Study of Gallium Oxide Nanostructure Films” en la modalidad póster del XXIX International Material Research Congress. Sociedad Mexicana de Materiales, A. C. Cancún Quintana Roo, México. 15 – 20 de agosto de 2021.



Sociedad Mexicana
de Materiales A.C.

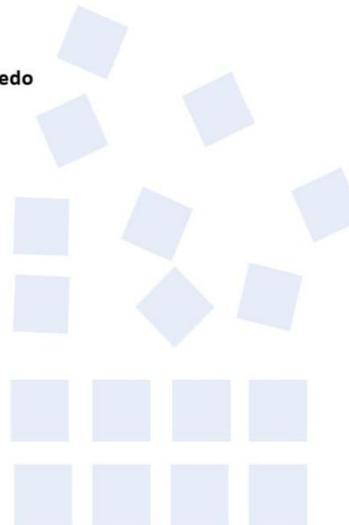
August 2021

TO WHOM IT MAY CONCERN
P r e s e n t

This is to certify that *Ana Lilia Melchor Tovilla, Elienai Cruz López, Cesar Augusto Camas F, María del Rosario Herrera Rivera, Heber Vilchis* presented the contribution: **STUDY OF GALLIUM OXIDE NANOESTRUCTURE FILMS** as **Poster** modality, in the *A6. Advances in Functional Semiconducting Materials* 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



SAG-P075

22 Reconocimiento por el trabajo de póster “Estudio de Películas Nanoestructuradas de Óxido de Galio” en el marco de la Semana de Divulgación de la Ciencia: Energías Renovables. Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables, Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas. Tuxtla Gutiérrez, Chiapas; México. 23 – 26 de agosto de 2021.



UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS
EL INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN EN ENERGÍAS
RENOVABLES

Otorga el presente

Reconocimiento

a la

Ing. Ana Lilia Melchor Tovilla

Por el trabajo de póster

“Estudio de películas nanoestructuradas de óxido de galio”

En la “Semana de Divulgación de la Ciencia: Energías Renovables”, en el marco del aniversario del Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables, realizado de manera virtual del 23 al 26 de agosto de 2021.



Orgullo UNICACH



Dr. Pascual López de Paz
Director



**Instituto de Investigación
e Innovación en
Energías Renovables**