



UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS

INSTITUTO DE INVESTIGACIÓN E INNOVACIÓN EN ENERGÍAS
RENOVABLES

TESIS

“ESTUDIO DE LA INFILTRACIÓN DE CARBONO EN UNA MATRIZ DE SILICIO POROSO EMPLEANDO DINÁMICA MOLECULAR”

QUE PARA OBTENER EL GRADO DE
MAESTRO EN MATERIALES Y SISTEMAS
ENERGÉTICOS RENOVABLES

PRESENTA

ANA LILIA MELCHOR TOVILLA

DIRECTOR

DR. HÉBER VILCHIS BRAVO

Tuxtla Gutiérrez; Chiapas

Agosto del 2024





UNIVERSIDAD DE CIENCIAS Y ARTES DE CHIAPAS AUTÓNOMA

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas a 27 de agosto de 2024
Oficio No. SA/DIP/0602/2024
Asunto: Autorización de Impresión de Tesis

C. Ana Lilia Melchor Tovilla

CVU: 1189836

Candidata al Grado de Maestra en Materiales y Sistemas Energéticos Renovables

Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables


UNICACH

Presente

Con fundamento en la **opinión favorable** emitida por escrito por la Comisión Revisora que analizó el trabajo terminal presentado por usted, denominado **Estudio de la Infiltración de Carbono en una Matriz de Silicio Poroso Empleando Dinámica Molecular** cuyo Director de tesis es el Dr. Héber Vilchis Bravo (CVU: 204243) quien avala el cumplimiento de los criterios metodológicos y de contenido; esta Dirección a mi cargo **autoriza** la impresión del documento en cita, para la defensa oral del mismo, en el examen que habrá de sustentar para obtener el **Grado de Maestra en Materiales y Sistemas Energéticos Renovables**.

Es imprescindible observar las características normativas que debe guardar el documento impreso, así como realizar la entrega en esta Dirección de un ejemplar empastado.

Atentamente
“Por la Cultura de mi Raza”


Dra. Carolina Orantes García
Directora



C.c.p. Dr. José Francisco Pola Albores, Director del Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables UNICACH. Para su conocimiento.
Dr. Carlos Alonso Meza Avendaño, Coordinador del Posgrado, Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables, UNICACH. Para su conocimiento.
Archivo/minutario.

RJAG/COG/hyb/ligp/gtr

2024 Año de Felipe Carrillo Puerto
BENEMÉRITO DEL PROLETARIADO,
REVOLUCIONARIO Y DEFENSOR DEL MAYAB.



Secretaría Académica
Dirección de Investigación y Posgrado
Libramiento Norte Poniente No. 1150
Colonia Lajas Maciel C.P. 29039
Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, México
Tel:(961)6170440 EXT.4360
investigacionyposgrado@unicach.mx



“Lleva a cabo un acto de bondad al azar, sin esperar recompensa, con la certeza de que algún día alguien podría hacer lo mismo por ti”

Lady Di (1961 – 1997)

"Cuando era niño soñaba, pero dejé de soñar y empecé a hacer, porque es el poder de lo que se realiza lo que vuelve los sueños realidad"

Usain Bolt



AGRADECIMIENTOS

A mis padres, Olga y Hermelindo, por su apoyo incondicional y el inmenso amor que me tienen. Gracias por ser mi ejemplo a seguir y siempre velar por mi bienestar.

A mis hermanas, Fernanda y Rocío, por ser mis confidentes y maestras de la vida. Gracias por estar cuando más las necesitaba.

A Pablo Gilberto Gómez Flores, por todo tu apoyo, comprensión y amor desde el comienzo de esta aventura.

Al Dr. Heber Vilchis Bravo, por su dedicación y paciencia. Sin sus palabras y correcciones precisas no hubiese podido lograr llegar a esta instancia tan anhelada. Gracias por su guía y todos sus consejos, los llevaré grabados para siempre en la memoria.

Agradezco a mi comité tutorial conformado por los Dres. Francisco S. Ramírez González y César A. Camas Flores, quienes, con sus recomendaciones, explicaciones y aportes desde cada una de sus perspectivas, enriquecieron y contribuyeron a la mejora del proyecto de investigación.

Agradezco al Instituto de Investigación e Innovación en Energías Renovables (IIER) y a la Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas (UNICACH), por permitirme ser parte del orgullo UNICACH. De forma particular agradezco a la Dra. Guadalupe Morales y a la Ing. Adriana Flores, por todo su apoyo durante estos dos años.

Al Dr. Godofredo García Salgado por permitirme realizar la estancia de investigación en la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla.

A todos mis compañeros los cuales muchos de ellos se han convertido en mis amigos y cómplices. Gracias por las horas compartidas, los trabajos realizados en conjunto y las historias vividas.

Y de forma especial, agradezco a CONAHCYT por el apoyo económico otorgado durante el desarrollo del proyecto, el cual fue punto clave para un buen desarrollo del proyecto, además agradezco por el apoyo otorgado a través del proyecto #1046631 de Ciencias de Frontera 2019.



CONTENIDO

AGRADECIMIENTOS	IV
CONTENIDO.....	V
LISTA DE FIGURAS	VIII
LISTA DE TABLAS.....	X
ABREVIATURAS	XI
RESUMEN.....	XII
ABSTRACT	XIII
INTRODUCCIÓN	14
Declaración del problema	16
Objetivo general	17
Objetivos particulares.....	17
Estado del arte	17
Enfoque experimental	17
Enfoque teórico-computacional	21
REFERENCIAS DE LA INTRODUCCIÓN.....	24
CAPÍTULO 1 MARCO TEÓRICO	30
1.1 Óxido de grafeno	30
1.1.1 Preparación del óxido de grafeno.....	30
1.1.2 Método de Hummers mejorado.....	31
1.1.3 Propiedades eléctricas	32
1.2 Silicio poroso	32
1.2.1 Fabricación del silicio poroso	33
1.2.2 Electrolito.....	35
1.2.3 Formación de poros.....	35
1.2.4 Características morfológicas	36
1.2.5 Fotoluminiscencia	38
1.3 Métodos de caracterización	38
1.3.1 Difracción de Rayos X.....	39



1.3.2	Ley de Bragg	40
1.3.3	Microscopia electrónica de barrido (SEM).....	40
1.3.4	Espectroscopia de rayos X de energía dispersa (EDS)	42
1.3.5	Microscopio de Fuerza Atómica (AFM).....	43
1.3.6	Espectroscopía Raman	43
1.4	Dinámica Molecular	44
1.4.1	Potencial interatómico.....	44
1.4.2	Software	45
1.5	Visualizador molecular.....	46
REFERENCIAS DEL CAPÍTULO 1.....		48
CAPÍTULO 2 DESARROLLO METODOLÓGICO.....		53
2.1	Óxido de grafeno	53
2.2	Obtención del silicio poroso	54
2.2.1	Celda de anodización	55
2.2.3	Fuente de alimentación	55
2.3	Métodos de caracterización	56
2.3.1	Caracterización por Difracción de Rayos X	56
2.3.2	Caracterización por Microscopía Electrónica de Barrido.....	57
2.3.3	Caracterización por Espectroscopia de Rayos X de Energía Dispersa.....	57
2.3.4	Caracterización por Microscopía de Fuerza Atómica.....	58
2.3.5	Caracterización por Espectroscopia Raman.....	58
2.4	Simulación computacional	59
2.4.1	Potencial interatómico.....	59
2.4.2	Condiciones de la región porosa	60
2.4.3	Condiciones de frontera	61
2.4.4	Funcionalización de zonas porosas	61
REFERENCIAS DEL CAPÍTULO 2.....		63
CAPÍTULO 3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN		64



3.1	Resultados experimentales	64
3.1.1	Caracterización por Difracción de Rayos X	64
3.1.2	Caracterización por Microscopía Electrónica de Barrido.....	65
3.1.3	Caracterización por Espectroscopia de Dispersión de Energía	66
3.1.4	Caracterización por Microscopio de Fuerza Atómica	67
3.1.5	Caracterización por Espectroscopia Raman.....	68
3.2	Resultados de simulación	69
3.2.1	Matriz de silicio poroso.....	69
3.2.2	Funcionalización de la matriz de silicio poroso.....	72
3.2.3	Interacciones carbono silicio.....	74
3.2.4	Caracterización por Difracción de Rayos X por medio de DM.....	75
	REFERENCIAS DEL CAPITULO 3.....	79
	CAPÍTULO 4 CONCLUSIONES.....	80
4.1	Trabajo a futuro	81
	ANEXOS.....	82
A.	Ejemplo de código desarrollado en LAMMPS para C/MSP	82
B.	Resumen de producción y participación académica	84

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1. Representación de las diferencias entre en método de Hummers, el método mejorado y el modificado [8].	31
Figura 1.2 Mecanismo de formación de los poros [25].	36
Figura 1.3. Esquemáticas morfológicas del silicio poroso [26].	37
Figura 1.4. Espectros de fotoluminiscencia en silicio poroso con diversas porosidades [27].	38
Figura 1.5. Esquema del mecanismo de un XRD [31].	39
Figura 1.6. Diagrama de la ley de Bragg [33].	40
Figura 1.7. Esquema del mecanismo de un SEM [37].	41
Figura 1.8. Interacción esquemática entre el haz de electrones y la muestra [40].	42
Figura 1.9. Diferentes modos de operación del AFM: Contacto, no contacto y tapping [42].	43
Figura 1.10. Esquema de la configuración de un espectroscopio Raman [44].	44
Figura 2.1. GO obtenido con el método de Hummers mejorado.	53
Figura 2.2. Fotografía del SP bajo luz UV.	54
Figura 2.3. Esquema de una celda de anodización vista de perfil [2].	55
Figura 2.4. Fuente de alimentación utilizada en este proyecto.	56
Figura 2.5. Difractómetro de Rayos X Rigaku Ultima IV.	56
Figura 2.6. SEM marca JEOL modelo JSM 6010LA.	57
Figura 2.7. AFM Park Systems modelo Park XE7.	58
Figura 2.8. Espectroscopia Raman Horiba modelo Jobin HR 800.	58
Figura 3.1. Patrón de difracción del OG.	64
Figura 3.2. Patrones de difracción a) Matriz de silicio poroso (mSP), y b) mSP funcionalizada con átomos de C.	65
Figura 3.3. Micrografía SEM lateral del SP.	66
Figura 3.4. Mapeo EDS transversal del SP funcionalizado donde se mapean C, O y Si.	67
Figura 3.5. Imágenes AFM a) SP y b) SP funcionalizado con carbono.	68
Figura 3.6. Espectroscopía Raman.	69
Figura 3.7. Visualización de los resultados de simulación: a) Silicio cristalino (cSi), y b) tres zonas porosas sobre el cSi. Puntos amarillos = átomos de Si, malla	

azul oscuro = zona inferior, malla azul medio = zona media, y malla azul claro = zona superior. 70

Figura 3.8. Malla superficial de la simulación de la mSP, donde a) es una vista superior y b) es una vista de la interfaz entre la mSP y el cSi. 71

Figura 3.9. Acercamiento de la mSP donde se observa la textura piramidal del cSi. 71

Figura 3.10. Vista superior de la mSP funcionalizado: a) mSP en cSi sin átomos de C, b) 75 átomos de C depositados, c) 120 depositados, y d) 201 depositados. Puntos magenta = átomos de C, puntos amarillos = átomos de Si y malla azul = mSP. 73

Figura 3.11. Interacciones C-C, C-Si: a) Vista superior, y b) ortogonal. Puntos amarillos = átomos de Si, puntos magenta = átomos de C, malla azul = mSP y líneas claras = posible radio de interacción [5]. 75

Figura 3.12. Difractograma del cSi obtenido con LAMMPS. 76

Figura 3.13. Comparación del difractograma del cSi con la mSP. 77

Figura 3.14. Comparación del difractograma de C/mSP y la mSP. 78



LISTA DE TABLAS

Tabla 1. Propiedades eléctricas del óxido de grafeno.....	32
Tabla 2. Clasificación de los tipos de poros.....	33
Tabla 3. Parámetros del potencial de Tersoff para SiC.....	60
Tabla 4. Zonas de espesor y porcentajes de porosidad de la mSP.....	70
Tabla 5. Átomos de carbono inyectados en el modelo de la mSP.....	72
Tabla 6. Porcentaje de átomos de C depositado por zona de porosidad.....	73
Tabla 7. Patrones de difracción en los difractogramas de cSi, RRUFF y cSi considerando el desplazamiento.....	77



ABREVIATURAS

AFM	Atomic Force Microscopy (Microscopio de Fuerza Atómica)
AMBER	Assisted Model Building with Energy Refinement (Construcción Asistida de Modelos con Refinamiento Energético)
cSi	Silicio Cristalino
FTIR	Fourier Transform Infrared Spectroscopy (Espectroscopía Infrarroja por Transformada de Fourier)
OG	Óxido de Grafeno
GROMACS	Groningen Machine for Chemical Simulations (Máquina de Simulación Química de Groningen)
H₂SO₄	Ácido Sulfúrico
H₃PO₄	Ácido Fosfórico
KMnO₄	Permanganato de Potasio
LAMMPS	Large-Scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator (Simulador Paralelo Masivo Atómico/Molecular A Gran Escala)
DM	Dinámica Molecular
NaNO₃	Nitrato de Sodio
NVT	Ensamble Canónico
PANI	Polianilina
mSP	Matriz de Silicio Poroso
SP	Silicio Poroso
ReaxFF	Reactive Force Field (Campo de Fuerza Reactiva)
rOG	Óxido de Grafeno Reducido
Si	Silicio
XRD	Difracción de Rayos X (X-ray Diffraction)
ZnO	Óxido de Zinc

RESUMEN

En la presente investigación, se analizó la funcionalización de una matriz porosa de silicio (mSP) con átomos de carbono, a partir de la experimentación y la teoría computacional. En la parte experimental, las matrices se fabricaron por medio de obleas de silicio cristalino (cSi) tipo p mediante ataque electroquímico, y el óxido de grafeno (OG) se obtuvo mediante el método de Hummers mejorado para funcionalizar la mPS. Como resultado se obtuvieron composites de carbono-silicio agregando GO en el electrolito durante el ataque. Los composites de carbono-silicio se caracterizaron mediante Difracción de Rayos X (XRD) y Microscopía de Fuerza Atómica (AFM). Para la parte computacional se desarrollaron simulaciones a través del uso de Dinámica Molecular, por medio del código LAMMPS y el potencial de tipo Tersoff, el cual es utilizado en simulaciones de sistemas atomísticos covalentes, como el silicio, el carbono y sus compuestos. De acuerdo con los resultados de la simulación se obtiene una mSP funcionalizado con átomos de carbono, lo cual se confirma con los resultados de XRD; por otra parte, mediante AFM se logró observar que la mSP es macroporoso y sus poros están distribuidos aleatoriamente. Mediante dinámica molecular se logró obtener un modelo de mSP y se funcionalizó con átomos de C, formándose aglomeraciones sobre las paredes de la mSP, indicando que el compuesto carbono-silicio se formó.



ABSTRACT

In this work, we studied the functionalization of a porous silicon matrix (PSm) with carbon atoms infiltration, using molecular dynamics; the simulation and experimental results are discussed. MSP were fabricated from p-type crystalline Silicon (cSi) wafers by electrochemical etching, and graphene oxide (GO) was obtained by improved Hummer's method in order to functionalize the PSm. A carbon-silicon composite was obtained by adding GO in the electrolyte during the etching. The carbon-silicon composite was characterized by X-ray Diffraction (XRD), and Atomic-Force Microscopy (AFM). For the computational part, simulations were developed through the use of Molecular Dynamics, using the LAMMPS code and the Tersoff-type potential, which is used in simulations of covalent atomistic systems, such as silicon, carbon and their compounds.. According with the simulation results, a PSm functionalized with carbon atoms is obtained, which is corroborated whit the XRD results. The PSm with an aleatory distributed macroporous are possible to observe on AFM images. Using molecular dynamics was possible to obtain the model of PSm on cSi and functionalize with C atoms forming agglomerations over the PSm walls which indicate the carbon-silicon composite.

INTRODUCCIÓN

Durante los últimos diez años, el silicio poroso ha sido objeto de una gran cantidad de investigaciones debido a su área superficial, que puede funcionalizarse con metales, óxidos o nanopartículas semiconductoras [1-3]. Debido a su extrema relación superficie-volumen y su alta tendencia a la oxidación, la fabricación de matrices de silicio poroso (mSP) ha despertado un gran interés [4]. La mSP se ha utilizado en una variedad de aplicaciones, incluidos sensores químicos [5], dispositivos optoelectrónicos [6, 7], dispositivos fotovoltaicos [8, 9], aplicaciones biomédicas [10, 11] y, recientemente, aplicaciones para baterías de iones de litio [12].

Se ha reportado que los alótopos de carbono se utilizan en conjunto con matrices de silicio poroso (mSP) para desarrollar dispositivos semiconductores como sensores [13], dispositivos de memoria [14], transistores [15] y dispositivos optoelectrónicos [16]. El óxido de grafeno (OG), un alótropo de carbono que ha surgido como precursor del grafeno, ofrece la posibilidad de producir materiales a base de carbono de manera económica y a gran escala [17]. El OG se ha utilizado en una amplia variedad de áreas [18], como el tratamiento de agua [19, 20], las pilas de combustible [21] y los condensadores [22].

Por otra parte, la dinámica molecular (DM) es un método de simulación computacional que simula el comportamiento de moléculas y átomos a través del tiempo. De acuerdo con la mecánica clásica y las funciones de energía potencial interatómica, las simulaciones DM calculan las posiciones y velocidades de los átomos a medida que evolucionan en el tiempo. Según la ley de la mecánica clásica,

esta técnica puede estimar los datos de los experimentos en potenciales restrictivos para guiar los cálculos dinámicos y combinar los datos experimentales con el conocimiento sobre las propiedades generales de la estructura molecular que están presentes en los cientos de parámetros de un campo molecular [23].

Existen softwares especializados empleados para resolver ecuaciones de cálculos dinámicos, como GROMACS (Groningen Machine for Chemical Simulations) [24], AMBER (Assisted Model Building with Energy Refinement) [25], Avogadro [26], CP2K [27], entre otros. El software de código abierto llamado LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) [28] se enfoca en modelar sistemas de grano grueso, materiales blandos, y de estado sólido. Los modelos DM en este trabajo se realizan utilizando LAMMPS. Un archivo de entrada básico de LAMMPS está compuesto por cuatro partes: 1) Inicialización: en el que se establecen los parámetros de simulación como las unidades, la dimensión y el estilo de enlace; 2) Definición del sistema: incluye la creación de la celda de simulación y declaración de datos como el espaciado de red y región geométrica; 3) Configuración de la simulación: se especifican configuraciones como coeficientes de par, pasos de tiempo y opciones de salida; 4) Realización de la simulación: se genera un archivo de salida alfanumérico [29]. Para analizar los datos del archivo de salida se utiliza software de visualización molecular. Este software de visualización es una herramienta que interpreta los datos del archivo de salida para estudiar la simulación mediante la generación de una reconstrucción 3D [30].

Se ha investigado la capacidad de mSP con OG para la creación de fuentes de luz integradas [31], sensores fluorescentes de alta sensibilidad [32],

supercondensadores híbridos [33] y usos de biosensores [34]. Se utiliza la funcionalización mSP para obtener un compuesto de carbono-silicio (C-Si), que tiene una morfología del tipo core-shell, donde los átomos de C cubren aglomerados de silicio en las paredes de silicio poroso. El compuesto C-Si combina las ventajas de ambos materiales como: la estructura microporosa de los materiales de carbono con la alta estabilidad térmica y la gran área específica del silicio poroso [35]. Debido a sus propiedades de conductividad eléctrica y térmica, el estudio de los compositos de C-Si han tenido un impacto significativo debido a sus múltiples aplicaciones, incluidos los nanocables [36], los sensores de gas [37] y el almacenamiento de energía [38].

Declaración del problema

La funcionalización de la mSP con OG se ha estudiado para fabricar fuentes de luz integradas [26], sensores fluorescentes de alta sensibilidad [27], supercondensadores híbridos [28] y aplicaciones de biosensores [29]. Se obtiene un compuesto de carbono-silicio (C-Si) mediante la funcionalización MSP, que tiene una morfología core-shell, donde los átomos de C forman aglomeraciones en las paredes del silicio poroso. En la actualidad, el estudio de los compositos de C-Si, ha causado un gran impacto debido a sus diversas aplicaciones como nanocables [30], sensores de gas [31] y almacenamiento de energía [32], esto debido a sus propiedades de conductividad eléctrica y térmica; sin embargo, la falta de análisis en la funcionalización de la mSP provoca que información acerca de las propiedades estructurales, mecánicas y térmicas sean erróneas.

Objetivo general

Analizar la funcionalización de una matriz de silicio poroso con átomos de carbono mediante simulaciones de dinámica molecular, correlacionando los modelos con resultados experimentales para estudiar sus características estructurales.

Objetivos particulares

1. Modelar la matriz de silicio poroso y su funcionalización con átomos de carbono por dinámica molecular.
2. Emular y analizar las características estructurales y morfológicas del composito.
3. Analizar sus características estructurales y morfológicas correlacionándolo con resultados experimentales.

Estado del arte

A continuación, se presentan los avances y desarrollos que se han llevado a cabo haciendo la clasificación entre el enfoque experimental y computacional.

Enfoque experimental

R. Juárez-Nahuatlato, et al 2018 sintetizaron partículas de óxido de zinc (ZnO) dentro de una matriz de silicio poroso durante el proceso electrolítico utilizando oblea de silicio tipo p en ácido fluorhídrico (HF) que contiene formaldehído (CH₂O) y sulfato de zinc hidratado como electrolito. Durante la anodización

electroquímica depositaron ZnO y formaron poros simultáneamente. Con XRD confirmaron la presencia de ZnO dentro del SP y con espectroscopia de fotoluminiscencia verificaron las emisiones ultravioleta y roja de ZnO dentro del SP. Los autores concluyeron que las propiedades ópticas de ZnO/SP fueron mejoradas por el proceso de funcionalización y lograron demostrar la formación de un material mesoporoso.

Por otro lado, Moretta, R., et al 2018 propusieron una estrategia química covalente para obtener OG sobre silicio macroporoso y aplicarlo en biomédica. El silicio macroporoso fue fabricado por el método de ataque electroquímico. El proceso consiste en sumergir el sustrato de Si en ácido fluorhídrico con etanol e inducir una densidad de corriente de 20 mA/cm^2 , posteriormente se agregó OG en el SP utilizando una solución de clorhidrato de N-(3-dimetilaminopropil)-N'-etilcarbodiimida con N-hidroxisuccinimida dejándose durante la noche a temperatura ambiente. En este trabajo demostraron la realización de un dispositivo híbrido OG/SP e investigaron sus propiedades para su aplicación en biodetección. Mediante las técnicas de caracterización como el microscopio de fuerza atómica (AFM), microscopio electrónico de barrido (SEM) y las mediciones del ángulo de contacto, se corroboró que este dispositivo puede ser empleado como material transductor para diagnósticos biomédicos, monitoreo ambiental y control de calidad de alimentos.

En 2019, Boychuk, V. M., et al sintetizaron óxido de grafeno reducido (OGr), el cual fue obtenido por el método de Hummers y el método de Marcano-Tour para así comparar las propiedades eléctricas entre ambos. Dentro de los resultados encontraron que el OGr obtenido por el método de Hummers está formado por

aglomerados en forma de placa, mientras que el OGr obtenido por el método Marcano-Tour es un material sólido mesoporoso. Determinaron que las propiedades estructurales y morfológicas de OG y OGr están relacionadas con la exclusión del NaNO_3 , el aumento de KMnO_4 y el uso de la mezcla $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_3\text{PO}_4$, por lo tanto, el método Marcano-Tour permite obtener menos defectos en el plano basal del grafeno que el método de Hummers.

Por otro lado, Rai, S., et al compararon las respuestas en la oscuridad y la fotocorriente de las heterouniones porosas de Si/OG-polianilina (PANI) y Si/OGr-PANI con el fin de aplicarlo en el ámbito fotovoltaico. El SP se sintetizó utilizando un método de ataque químico asistido por metal no electrolítico empleando Si de tipo n. El OG y OGr se sintetizaron usando el método Hummers modificado, para reducir el OG usaron ácido ascórbico como agente reductor. La PANI se sintetizó mediante una reacción química de polimerización oxidativa. Por último, para fabricar la heterounión, las muestras de SP se sumergieron en una dispersión de OG, OGr, OG/PANI y OGr/PANI con etanol en una proporción de 1:2 y se dejaron secar. Dentro de los resultados más destacados se encuentra el análisis de SEM, el cual mostró hojas arrugadas de OG y una hoja delgada de OGr depositado en la superficie del SP. Los resultados de XRD y espectroscopía infrarroja por transformada de Fourier (FTIR, por sus siglas en inglés) confirmaron la fabricación de heterounión. Las características I-V mostraron un aumento en la corriente para las heterouniones con iluminación de 1 sol y los valores de fotosensibilidad y fotorresponsabilidad fueron más altos para la heterounión SP/ OGr-PANI.

En el 2020, Colom, X., et al analizaron la estructura de tres muestras comerciales de OG (AOG, EOG y COG), las cuales posteriormente redujeron (AOGGr, EOGGr y

COGr). Con el método de Hummers. Los resultados obtenidos demuestran que las muestras AOG y EOG son estructuralmente muy parecidas mientras que la muestra COG es totalmente distinta; por otro lado, los resultados de las muestras reducidas demuestran que la estructura inicial del OG es determinante en el comportamiento térmico. El análisis de la morfología indica que los OGs con mayor dispersión de grupos oxidados, presentan una estructura laminar más precisa en el proceso de reducción. La reducción de las muestras con baja dispersión de los grupos oxidados define estructuras menos laminares y más carbonáceas.

Hussien, Adi M., et al realizaron un sensor de vapor químico con OGr dopado con nanopartículas de oro (AuNPs) sobre SP. El OGr se sintetizó mediante el método de exfoliación electroquímica utilizando GF, para realizar el dopado con las AuNPs se utilizó un baño ultrasónico y El SP se fabricó usando el sistema electroquímico. Para realizar el depósito del OGr: AuNPs en el SP se utilizó el método de OGteo. Dentro de los resultados más destacados se encuentra la caracterización por AFM, en cual se muestra que el SP tiene una gran densidad y homogeneidad en poros; los resultados correspondientes al OGr muestran que el tamaño del poro aumentó. Por otro lado, reportaron que la sensibilidad del SP vapor orgánico químico se modificó al recubrir la superficie con OGr: AuNP, gracias a la alta absorbancia de los materiales dopantes nanometálicos. Observaron un aumento en la intensidad de la fotoluminiscencia en todas las muestras después de depositar OGr sobre la superficie de PS. Hussien, Adi y su equipo descubrieron que la sensibilidad del SP al vapor de compuestos orgánicos se modificó al recubrir la superficie con OGr, debido a la alta absorbancia de los nanometales dopantes.

Enfoque teórico-computacional

En la búsqueda literaria de modelos computacionales, podemos encontrar que Chenoweth, K. et al. (2008) investigaron las reacciones químicas iniciales asociadas con la oxidación de hidrocarburos en fase gaseosa a alta temperatura, haciendo uso de potenciales interatómicos de tipo ReaxFF para incluir estados de transición adicionales y reactividad química. Realizaron diversas simulaciones de ensambles canónicos en varios sistemas de hidrocarburos/O₂. A partir de simulaciones en mezclas de metano/O₂, o-xileno/O₂, propeno/O₂ y benceno/O₂, encontraron que este potencial obtiene la tendencia de reactividad correcta (propeno > o-xileno > metano > benceno), siguiendo la tendencia en la mezcla C-H. También analizaron en detalle las reacciones durante una oxidación completa de metano, propeno y o-xileno aislados una mezcla de CO/CO₂/H₂O y concluyeron que el potencial ReaxFF proporciona un método útil para determinar los iniciales de oxidación de hidrocarburos en condiciones extremas.

En 2012, Newsome, D. et al estudiaron simulaciones del proceso de oxidación inicial de una superficie de SiC expuesta a moléculas de O₂ y H₂O con un potencial interatómico ReaxFF. En ese trabajo, ampliaron el campo de fuerza ReaxFF con nuevos datos de mecánica cuántica sobre la energía de enlace, la ecuación de estado y el calor de formación del cristal de SiC, junto con datos de estudios anteriores que describen interacciones del tipo Si-Si, Si-O y Si-H. Los análisis mostraron que el SiC se transforma gradualmente en óxidos de silicio con la formación simultánea de una capa similar al grafito (GF). En presencia de exceso de O₂, la capa similar a GF se oxidó aún más a CO y CO₂. También analizaron las trayectorias con grupos de dos y tres átomos para rastrear cuantitativamente el

progreso de la oxidación. Este análisis mostró la formación de enlaces Si-O y C-C, lo que indica oxidación de SiC con formación simultánea de una estructura similar al carbono. Se encontró que el consumo de SiC con O₂ era más rápido que con H₂O.

Posteriormente, en el 2020, Patil, S. et al utilizaron dinámica molecular para incorporar fibras de vidrio, láminas de grafeno y nanotubos de carbono en la matriz de aerogel de sílice y de esta forma mejorar las propiedades mecánicas y sus características de deformación debido a las grietas preexistentes. En este trabajo investigaron y compararon las propiedades mecánicas obtenidas de ensayos de tensión y compresión de aerogeles de sílice nativos y sus nanocompuestos. Los resultados muestran que las propiedades mecánicas en dirección axial y lateral de los nanocompuestos a base de carbono son significativamente más altas que las de los aerogeles de sílice nativos y reforzados con fibras de vidrio. Además, la influencia de la profundidad de la grieta se ha estudiado en las simulaciones de fracturas por tracción, y encontraron que, en los nanocompuestos, los candidatos a soportar cargas de tracción son principalmente materiales reforzados.

En ese mismo año, Chen, Z. et al estudiaron las simulaciones del proceso de oxidación inicial de 3C-SiC, en el cual utilizaron diferentes superficies polares C (100), C (111), Si (100) y Si (111) expuestas a H₂O. Los resultados mostraron que el SiC se convierte gradualmente en óxido de silicio y forma cadenas de carbono de baja densidad. La energía de activación de la cara C es menor que la de la cara Si, lo que refleja una menor estabilidad oxidativa. Además, llevaron a cabo una reacción de oxidación sobre una superficie de C (100) con diferentes relaciones de concentración de H₂O y O₂. Los resultados indican que la velocidad de reacción

del O_2 es mucho mayor que la del H_2O , mientras que la capacidad de oxidación del O_2 mejora efectivamente con la adición de agua.

En el 2021, Fatriansyah, J. et al. desarrollaron una simulación de dinámica molecular simple utilizando LAMMPS para calcular la absorción de hidrógeno en Zeolita Socony Mobil-5 (ZSM-5), nanofibras de GF, estructuras de OG y OGr. La ZSM-5 se construyó en el software Avogadro utilizando una base de datos de IZA (IZA Structure Commission, 2020), la GNF se creó directamente desde Avogadro, mientras que el OG y OGr se crearon a partir de los softwares Graphene Oxide Generator y Python-27, respectivamente. Dentro de sus resultados encontraron que el valor de absorción de hidrógeno disminuye con el aumento de temperatura para todas las muestras, concluyendo que el valor de absorción de hidrógeno disminuye con el aumento de la temperatura para todas las muestras.

REFERENCIAS DE LA INTRODUCCIÓN

- [1] S.-U. Victor, C.U. Yendry Regina, V.-B.J. Roberto, Immobilization of Gold and Silver on a Biocompatible Porous Silicone Matrix to Obtain Hybrid Nanostructures, *J Biomater Nanobiotechnol* 09 (2018) 41–50. <https://doi.org/10.4236/jbnb.2018.91004>.
- [2] D.H. Jwied, U.M. Nayef, F.A.-H. Mutlak, Preparation and characterization of C:Se nano-rods ablated on porous silicon, *Optik (Stuttg)* 239 (2021) 166811. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.166811>.
- [3] W. Deng, X. Yu, M. Sahimi, T.T. Tsotsis, Highly permeable porous silicon carbide support tubes for the preparation of nanoporous inorganic membranes, *J Memb Sci* 451 (2014) 192–204. <https://doi.org/10.1016/j.memsci.2013.09.059>.
- [4] V. Torres-Costa, R.J. Martín-Palma, Application of nanostructured porous silicon in the field of optics. A review, *J Mater Sci* 45 (2010) 2823–2838. <https://doi.org/10.1007/s10853-010-4251-8>.
- [5] D.H. Jwied, U.M. Nayef, F.A.-H. Mutlak, Synthesis of C:Se nanoparticles via laser ablated with magnetic field on porous silicon for gas sensor applications, *Optik (Stuttg)* 242 (2021) 167207. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.167207>.
- [6] Y. Ren, X. Yin, R. Xiao, T. Mu, H. Huo, P. Zuo, Y. Ma, X. Cheng, Y. Gao, G. Yin, Y. Li, C. Du, Layered porous silicon encapsulated in carbon nanotube cage as ultra-stable anode for lithium-ion batteries, *Chemical Engineering Journal* 431 (2022) 133982. <https://doi.org/10.1016/j.cej.2021.133982>.
- [7] Q. Lei, J. Guo, A. Nouredine, A. Wang, S. Wuttke, C.J. Brinker, W. Zhu, Sol–Gel-Based Advanced Porous Silica Materials for Biomedical Applications, *Adv Funct Mater* 30 (2020). <https://doi.org/10.1002/adfm.201909539>.
- [8] L.A. Osminkina, S.N. Agafilushkina, E.A. Kropotkina, N.Y. Saushkin, I. V. Bozhev, S.S. Abramchuk, J. V. Samsonova, A.S. Gambaryan, Antiviral adsorption activity of porous silicon nanoparticles against different pathogenic human viruses, *Bioact Mater* 7 (2022) 39–46. <https://doi.org/10.1016/j.bioactmat.2021.06.001>.
- [9] S.S. Khudiar, F.A.-H. Mutlak, U.M. Nayef, Synthesis of ZnO nanostructures by hydrothermal method deposited on porous silicon for photo-conversion application, *Optik (Stuttg)* 247 (2021) 167903. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2021.167903>.

- [10] S. Rai, R. Bhujel, J. Biswas, U. Deka, B.P. Swain, Dark and photocurrent response of porous Si/GO-PANI and Si/rGO-PANI heterojunctions for photovoltaics applications, *Mater Today Proc* 39 (2021) 1848–1851. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.07.373>.
- [11] H.D. Jabbar, M.A. Fakhri, M.J. AbdulRazzaq, Synthesis Gallium Nitride on Porous Silicon Nano-Structure for Optoelectronics Devices, *Silicon* 14 (2022) 12837–12853. <https://doi.org/10.1007/s12633-022-01999-8>.
- [12] C.P. Verma, K. Asokan, D. Kanjilal, G.V. Prakash, Tuning the optical properties of porous silicon-based microcavities by energetic oxygen ion beams for optoelectronic applications, *Mater Lett* 306 (2022) 130914. <https://doi.org/10.1016/j.matlet.2021.130914>.
- [13] H. Xu, W. He, Z. Li, J. Chi, J. Jiang, K. Huang, S. Li, G. Sun, H. Dou, X. Zhang, Revisiting Charge Storage Mechanism of Reduced Graphene Oxide in Zinc Ion Hybrid Capacitor beyond the Contribution of Oxygen-Containing Groups, *Adv Funct Mater* 32 (2022). <https://doi.org/10.1002/adfm.202111131>.
- [14] R.M. Nauman Javed, A. Al-Othman, M. Tawalbeh, A.G. Olabi, Recent developments in graphene and graphene oxide materials for polymer electrolyte membrane fuel cells applications, *Renewable and Sustainable Energy Reviews* 168 (2022) 112836. <https://doi.org/10.1016/j.rser.2022.112836>.
- [15] A. Abdelkhalek, M.A. El-Latif, H. Ibrahim, H. Hamad, M. Showman, Controlled synthesis of graphene oxide/silica hybrid nanocomposites for removal of aromatic pollutants in water, *Sci Rep* 12 (2022) 7060. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-10602-4>.
- [16] F. Jia, X. Xiao, A. Nashalian, S. Shen, L. Yang, Z. Han, H. Qu, T. Wang, Z. Ye, Z. Zhu, L. Huang, Y. Wang, J. Tang, J. Chen, Advances in graphene oxide membranes for water treatment, *Nano Res* 15 (2022) 6636–6654. <https://doi.org/10.1007/s12274-022-4273-y>.
- [17] Y. Honarpazhouh, F.R. Astarai, H.R. Naderi, O. Tavakoli, Electrochemical hydrogen storage in Pd-coated porous silicon/graphene oxide, *Int J Hydrogen Energy* 41 (2016) 12175–12182. <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2016.05.241>.
- [18] Y. Zhu, S. Murali, W. Cai, X. Li, J.W. Suk, J.R. Potts, R.S. Ruoff, Graphene and Graphene Oxide: Synthesis, Properties, and Applications, *Advanced Materials* 22 (2010) 3906–3924. <https://doi.org/10.1002/adma.201001068>.

- [19] A. Garzon-Roman, D.H. Cuate-Gomez, Graphene nanoflakes and carbon nanotubes on porous silicon layers by spin coating, for possible applications in optoelectronics, *Sens Actuators A Phys* 292 (2019) 121–128. <https://doi.org/10.1016/j.sna.2019.04.013>.
- [20] Z. Peng, A.L. Ng, H. Kwon, P. Wang, C.-F. Chen, C.S. Lee, Y. Wang, Graphene as a functional layer for semiconducting carbon nanotube transistor sensors, *Carbon* N Y 125 (2017) 49–55. <https://doi.org/10.1016/j.carbon.2017.09.031>.
- [21] B. Aïssa, M. Nedil, J. Kroeger, T. Haddad, F. Rosei, Memory operation devices based on light-illumination ambipolar carbon-nanotube thin-film-transistors, *J Appl Phys* 118 (2015). <https://doi.org/10.1063/1.4931663>.
- [22] C.C. Villarreal, T. Pham, P. Ramnani, A. Mulchandani, Carbon allotropes as sensors for environmental monitoring, *Curr Opin Electrochem* 3 (2017) 106–113. <https://doi.org/10.1016/j.coelec.2017.07.004>.
- [23] T. Hansson, C. Oostenbrink, W. van Gunsteren, Molecular dynamics simulations, *Curr Opin Struct Biol* 12 (2002) 190–196. [https://doi.org/10.1016/S0959-440X\(02\)00308-1](https://doi.org/10.1016/S0959-440X(02)00308-1).
- [24] D. Van Der Spoel, E. Lindahl, B. Hess, G. Groenhof, A.E. Mark, H.J.C. Berendsen, GROMACS: Fast, flexible, and free, *J Comput Chem* 26 (2005) 1701–1718. <https://doi.org/10.1002/jcc.20291>.
- [25] R. Salomon-Ferrer, D.A. Case, R.C. Walker, An overview of the Amber biomolecular simulation package, *WIREs Computational Molecular Science* 3 (2013) 198–210. <https://doi.org/10.1002/wcms.1121>.
- [26] M.D. Hanwell, D.E. Curtis, D.C. Lonie, T. Vandermeersch, E. Zurek, G.R. Hutchison, Avogadro: an advanced semantic chemical editor, visualization, and analysis platform, *J Cheminform* 4 (2012) 17. <https://doi.org/10.1186/1758-2946-4-17>.
- [27] T.D. Kühne, M. Iannuzzi, M. Del Ben, V. V. Rybkin, P. Seewald, F. Stein, T. Laino, R.Z. Khaliullin, O. Schütt, F. Schiffmann, D. Golze, J. Wilhelm, S. Chulkov, M.H. Bani-Hashemian, V. Weber, U. Borštnik, M. TAILLEFUMIER, A.S. Jakobovits, A. Lazzaro, H. Pabst, T. Müller, R. Schade, M. Guidon, S. Andermatt, N. Holmberg, G.K. Schenter, A. Hehn, A. Bussy, F. Belleflamme, G. Tabacchi, A. Glöß, M. Lass, I. Bethune, C.J. Mundy, C. Plessl, M. Watkins, J. VandeVondele,

M. Krack, J. Hutter, CP2K: An electronic structure and molecular dynamics software package - Quickstep: Efficient and accurate electronic structure calculations, *J Chem Phys* 152 (2020). <https://doi.org/10.1063/5.0007045>.

[28] L.T. Kong, G. Bartels, C. Campaña, C. Denniston, M.H. Müser, Implementation of Green's function molecular dynamics: An extension to LAMMPS, *Comput Phys Commun* 180 (2009) 1004–1010. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2008.12.035>.

[29] A.P. Thompson, H.M. Aktulga, R. Berger, D.S. Bolintineanu, W.M. Brown, P.S. Crozier, P.J. in 't Veld, A. Kohlmeyer, S.G. Moore, T.D. Nguyen, R. Shan, M.J. Stevens, J. Tranchida, C. Trott, S.J. Plimpton, LAMMPS - a flexible simulation tool for particle-based materials modeling at the atomic, meso, and continuum scales, *Comput Phys Commun* 271 (2022) 108171. <https://doi.org/10.1016/j.cpc.2021.108171>.

[30] A. Stukowski, Visualization and analysis of atomistic simulation data with OVITO—the Open Visualization Tool, *Model Simul Mat Sci Eng* 18 (2010) 015012. <https://doi.org/10.1088/0965-0393/18/1/015012>.

[31] T. Wu, Q. Ke, M. Lu, P. Pan, Y. Zhou, Z. Gu, G. Cui, H. Lu, Recent Advances in Carbon-Silica Composites: Preparation, Properties, and Applications, *Catalysts* 12 (2022) 573. <https://doi.org/10.3390/catal12050573>.

[32] R. Moretta, L. De Stefano, M. Terracciano, I. Rea, Porous Silicon Optical Devices: Recent Advances in Biosensing Applications, *Sensors* 21 (2021) 1336. <https://doi.org/10.3390/s21041336>.

[33] B. Zhao, D. Chen, X. Xiong, B. Song, R. Hu, Q. Zhang, B.H. Rainwater, G.H. Waller, D. Zhen, Y. Ding, Y. Chen, C. Qu, D. Dang, C.-P. Wong, M. Liu, A high-energy, long cycle-life hybrid supercapacitor based on graphene composite electrodes, *Energy Storage Mater* 7 (2017) 32–39. <https://doi.org/10.1016/j.ensm.2016.11.010>.

[34] I. Rea, L. Sansone, M. Terracciano, L. De Stefano, P. Dardano, M. Giordano, A. Borriello, M. Casalino, Photoluminescence of Graphene Oxide Infiltrated into Mesoporous Silicon, *The Journal of Physical Chemistry C* 118 (2014) 27301–27307. <https://doi.org/10.1021/jp506539n>.

[35] I. Rea, M. Casalino, M. Terracciano, L. Sansone, J. Politi, L. De Stefano, Photoluminescence enhancement of graphene oxide emission by infiltration in an

aperiodic porous silicon multilayer, *Opt Express* 24 (2016) 24413. <https://doi.org/10.1364/OE.24.024413>.

[36] T. Wu, Q. Ke, M. Lu, P. Pan, Y. Zhou, Z. Gu, G. Cui, H. Lu, Recent Advances in Carbon-Silica Composites: Preparation, Properties, and Applications, *Catalysts* 12 (2022) 573. <https://doi.org/10.3390/catal12050573>.

[37] T. Ma, H. Xu, X. Yu, H. Li, W. Zhang, X. Cheng, W. Zhu, X. Qiu, Lithiation Behavior of Coaxial Hollow Nanocables of Carbon–Silicon Composite, *ACS Nano* (2019) acsnano.8b08962. <https://doi.org/10.1021/acsnano.8b08962>.

[38] T.L. Kelly, T. Gao, M.J. Sailor, Carbon and Carbon/Silicon Composites Templated in Rugate Filters for the Adsorption and Detection of Organic Vapors, *Advanced Materials* 23 (2011) 1776–1781. <https://doi.org/10.1002/adma.201004142>.

[39] R. Juárez-Nahuatlato, G. García, M. Pacio, R. Portillo, N. Perez-Amaro, F. Severiano, G. Nieto, T. Díaz-Becerril, E. Rosendo, R. Romano-Trujillo, A. Coyopol, V.L. Gayou, In Situ Growth of ZnO inside a Porous Silicon Matrix Obtained by Electrochemical Etching with a Hydrofluoric Acid-Formaldehyde Solution, *J Nanomater* 2019 (2019) 1–7. <https://doi.org/10.1155/2019/9863145>.

[40] R. Moretta, M. Terracciano, P. Dardano, M. Casalino, I. Rea, L. De Stefano, Covalent grafting of graphene oxide on functionalized macroporous silicon, *Open Material Sciences* 4 (2018) 15–22. <https://doi.org/10.1515/oms-2018-0002>.

[41] V.M. Boychuk, V.O. Kotsyubynsky, Kh. V. Bandura, I.P. Yaremiy, S. V. Fedorchenko, Reduced Graphene Oxide Obtained by Hummers and Marcano-Tour Methods: Comparison of Electrical Properties, *J Nanosci Nanotechnol* 19 (2019) 7320–7329. <https://doi.org/10.1166/jnn.2019.16712>.

[42] S. Rai, R. Bhujel, J. Biswas, U. Deka, B.P. Swain, Dark and photocurrent response of porous Si/GO-PANI and Si/rGO-PANI heterojunctions for photovoltaics applications, *Mater Today Proc* 39 (2021) 1848–1851. <https://doi.org/10.1016/j.matpr.2020.07.373>.

[43] X. Colom, J. Cañavate, M.J. Lis, G. Sanjuan, I. Gil, Análisis estructural de Óxidos de Grafeno (GO) y Óxidos de Grafeno reducidos (rGO), *Afinidad* 77 (2020).

- [44] A.M. Abdul Hussien, U.M. Nayef, H.T. Hussein, Preparation of chemical vapor sensor by reduction graphene oxide doped with nanoparticles of gold on porous silicon using photoluminescence, *Optik (Stuttg)* 206 (2020) 163576. <https://doi.org/10.1016/j.ijleo.2019.163576>.
- [45] K. Chenoweth, A.C.T. van Duin, W.A. Goddard, ReaxFF Reactive Force Field for Molecular Dynamics Simulations of Hydrocarbon Oxidation, *J Phys Chem A* 112 (2008) 1040–1053. <https://doi.org/10.1021/jp709896w>.
- [46] D.A. Newsome, D. Sengupta, H. Foroutan, M.F. Russo, A.C.T. van Duin, Oxidation of Silicon Carbide by O₂ and H₂O: A ReaxFF Reactive Molecular Dynamics Study, Part I, *The Journal of Physical Chemistry C* 116 (2012) 16111–16121. <https://doi.org/10.1021/jp306391p>.
- [47] S.P. Patil, P. Shendye, B. Markert, Molecular dynamics simulations of silica aerogel nanocomposites reinforced by glass fibers, graphene sheets and carbon nanotubes: A comparison study on mechanical properties, *Compos B Eng* 190 (2020) 107884. <https://doi.org/10.1016/j.compositesb.2020.107884>.
- [48] Z. Chen, Z. Sun, X. Chen, Y. Wu, X. Niu, Y. Song, ReaxFF reactive molecular dynamics study on oxidation behavior of 3C-SiC in H₂O and O₂, *Comput Mater Sci* 195 (2021) 110475. <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2021.110475>.
- [49] J.F. Fatriansyah, D. Dhaneswara, I. Suhariadi, M.I. Widyantoro, B.A. Ramadhan, M.Z. Rahmatullah, R. Hadi, Simple molecular dynamics simulation of hydrogen adsorption on ZSM 5, graphite nanofiber, graphene oxide framework, and reduced graphene oxide, *Heliyon* 7 (2021) e08528. <https://doi.org/10.1016/j.heliyon.2021.e08528>.

CAPÍTULO 1 MARCO TEÓRICO

1.1 Óxido de grafeno

El óxido de grafeno (OG) se ha estudiado durante más de un siglo, el primer investigador en llevar a cabo la síntesis fue B.C. Brodie en 1859 [1]. La base de su estructura general se define como una capa de carbono con ambas superficies modificadas por grupos funcionales que contienen oxígeno; además puede tener una estructura de una o varias capas [2]. Aunque el OG es un material de carbono bidimensional, sus propiedades son muy diferentes a las del grafeno: no absorbe la luz visible, tiene una conductancia eléctrica muy baja en comparación con la del grafeno y tiene una actividad química significativamente mayor. A pesar de estas propiedades, el OG es un material útil y prometedor para aplicaciones basadas en grafeno como lo es la electrónica [3], óptica [4], química [5], almacenamiento de energía [6] y biomédicas [7].

1.1.1 Preparación del óxido de grafeno

Existen diversas formas de preparar OG. Los métodos de exfoliación térmica como lo son el método de Brodie, Staudenmaier y Hoffman, incluyen el uso de ácidos fuertes (nítrico y/o azufre) y clorato de potasio mientras que los métodos de oxidación química como el método de Hummers-Hoffman utiliza una mezcla de nitrato de sodio (NaNO_3) y permanganato de potasio (KMnO_4) concentrados.

1.1.2 Método de Hummers mejorado

El método de Hummers es uno de los métodos más utilizados para preparar OG; sin embargo, este método fue mejorado al excluir el NaNO_3 , aumentar la cantidad de KMnO_4 y realizar la reacción en una mezcla 9:1 de $\text{H}_2\text{SO}_4/\text{H}_3\text{PO}_4$.

El método de Hummers mejorado (OGm) proporciona una mayor cantidad de material de OG en comparación con el método de Hummers o el método de Hummers modificado. En la **Figura 1.1** se puede observar que el OGm presenta una menor cantidad de material suboxidado indicándonos una mayor eficiencia en la obtención de material oxidado. Además, el OGm muestra un mayor rendimiento en aplicaciones como en membranas, rejillas TEM o fabricación de dispositivos sensibles a la temperatura [8].

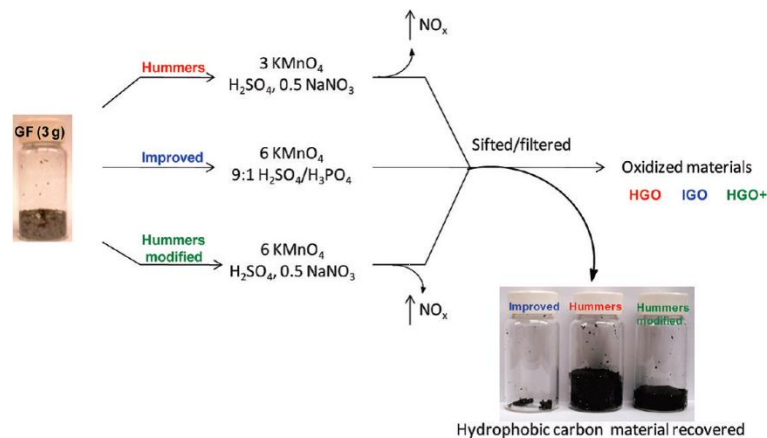


Figura 1.1. Representación de las diferencias entre en método de Hummers, el método mejorado y el modificado [8].

Este método nos proporciona características favorecedoras como mantener la conductividad eléctrica, no generar gases tóxicos y un mejor control de la temperatura.

1.1.3 Propiedades eléctricas

El proceso de síntesis de OG da como resultado la interrupción de los orbitales de enlace sp^2 del grafito y la adición de abundantes grupos superficiales que inhiben su conductividad eléctrica. Como resultado de esta alta resistividad, los investigadores han explorado técnicas de reducción de OG para formar OGr. Tras la reducción, la conductividad eléctrica del OG se puede mejorar en gran medida y se puede ajustar en varios órdenes de magnitud con conductividades que van desde ~ 0.1 S/m a 2.98×10^4 S/m [9]. En la **Tabla 1** se presenta un resumen de las propiedades eléctricas del OG.

Tabla 1. Propiedades eléctricas del óxido de grafeno.

Propiedad	Valor	Ref
Resistividad eléctrica	$1.64 \times 10^4 \Omega \cdot m$	[2]
Conductividad eléctrica	$\sim 0.1 - 2.98 \times 10^4$ S/m	[10]
Movilidad intrínseca	20 m^2/Vs	[11]
Movilidad del electrón	25 m^2/Vs	[9]

1.2 Silicio poroso

El silicio poroso (SP) fue descubierto por los Uhlir en la década de 1950 [12], pero fue hasta la década de los 90's que este material comenzó a tener el interés científico debido a su área superficial del SP [13].

De acuerdo a la Unión Internacional de Química Pura y Aplicada (IUPAC, por sus siglas en inglés), se clasifica en tres categorías teniendo en cuenta únicamente los parámetros diámetro de los poros y distancia entre poros, es decir, la geometría de los poros, ver **Tabla 2** [14]:

Tabla 2. Clasificación de los tipos de poros.

Diámetro de poro (nm)	Tipo de poro	Porcentaje de porosidad
<10	Micro	Bajo
10 – 50	Meso	Medio
>50	Macro	Alto

1.2.1 Fabricación del silicio poroso

El SP se genera mediante el ataque del cSi en electrolitos acuosos o no acuosos que contienen ácido fluorhídrico (HF). A continuación, se enlistan algunos tipos de ataque [15]:

- Anodización

Este método implica dos electrodos sumergidos en ácido fluorhídrico (HF) como solución electrolítica mientras se suministra una densidad de corriente constante [16].

- Ataque galvánico

Es un proceso anódico que ocurre en circuito abierto, y resulta de exponer un contacto metálico sobre una superficie semiconductor a una solución adecuada [17].

- Ataque de manchas

Este proceso consiste en atacar el silicio con ácido fluorhídrico y soluciones basadas en oxidantes químicos, sin necesidad de aplicar corriente eléctrica. Se conoce comúnmente como 'grabado por manchas' debido al cambio de color que produce [18].

- Ataque asistido por nanopartículas de metal

Este proceso utiliza depósitos de metales nobles sobre Si para aumentar su velocidad de disolución al grabar en una mezcla de HF y un agente oxidante [16].

- Foto-ataque

Este método no requiere electrodos y permite la formación de una capa de luminiscencia visible no solo sobre sustratos de Si monocristalinos sino también sobre estructuras silicio-aislante [19].

- Ataque con vapor de HNO_3/HF

En el método de grabado con vapor no hay contactos profundos con las soluciones ácidas, sólo se aplica un grabado por vapor. Este método muy simple y de bajo costo se adapta fácilmente para cubrir grandes superficies [20].

El SP se produce con mayor frecuencia mediante anodización, sin embargo, también se han investigado otros métodos de síntesis menos comunes [21]. El método de anodización consiste en sumergir obleas de silicio monocristalino tipo-p o tipo-n en una solución de ácido fluorhídrico/etanol (HF/EtOH) y exponer las obleas a una corriente específica durante el período de tiempo deseado. La oblea de silicio actúa como el ánodo, mientras que el cátodo está hecho convencionalmente de platino. La celda de anodización debe estar hecha de un polímero resistente a los ácidos como el teflón. Al hacer circular una corriente eléctrica entre los contactos (ánodo y cátodo), se lleva a cabo un ataque electroquímico el cual remueve parte del silicio dejando pequeños poros sobre la superficie del silicio [22].

El proceso de anodización se lleva a cabo comúnmente bajo condiciones controladas de corriente, lo que requiere que la fuente de alimentación esté configurada para mantener un voltaje constante. Es posible usar cualquier fuente

de alimentación, pero en general, pero debe cumplir con ciertas características como ser capaz de entregar corriente en un rango de pocos mA hasta por lo menos 1 A. Es importante destacar que la densidad de corriente es uno de los factores que determina los parámetros como porosidad, tamaño de poro y si la muestra presenta o no fotoluminiscencia [23].

1.2.2 Electrolito

Existen tres tipos principales de electrolitos que se usan en la actualidad: Acuoso, orgánicos y oxidantes. Los electrolitos acuosos son aquellos derivados del sistema HF-H₂O. Esto incluye mezclas con agua, sales que contienen flúor disueltas en H₂O (por ejemplo, NH₄F), compuestos de etanol (C₂H₄OH) y/o ácido acético (C₂H₃OH). Todos los electrolitos acuosos son bastante oxidantes, es decir, tienden a formar SiO₂. Los electrolitos orgánicos son una mezcla entre HF y algún solvente orgánico como el acetonitrilo (MeCN), la dimetilformamida (DMF) y la dimetilsulfoxie (DMSO). Por último, los electrolitos oxidantes son aquellos que no tienen iones F y contienen algún reactivo oxidante [24].

1.2.3 Formación de poros

En la **Figura 1.2** se muestra un esquema de la formación de poros donde, (1) el ion fluoruro (F) ataca la superficie de silicio saturada de hidrógeno (H); (2) el enlace Si-F se forma por ataque nucleofílico sobre el enlace Si-H mediante un ion F; (3) el segundo ataque de iones F reemplaza el enlace de hidrógeno restante; (4) debido a la reducción de la densidad de electrones, el HF o H₂O ataca el enlace

posterior Si-Si; (5) el tetrafluoruro reacciona con el HF produciendo una fluoroanión SiF_6 altamente estable [25].

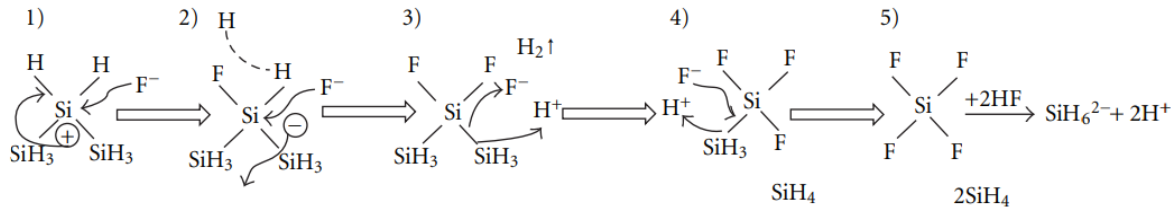


Figura 1.2 Mecanismo de formación de los poros [25].

1.2.4 Características morfológicas

La morfología es el aspecto menos cuantificable de un material; sin embargo, El SP tiene detalles interesantes con respecto al rango de variaciones en el tamaño, forma, orientación, ramificación, interconexión y distribución de los poros. Las diversas características morfológicas del SP reportadas en la literatura se clasifican en 4 aspectos [26]:

- Orientación de poros
- Relleno de macroporos
- Ramificación
- Variación de profundidad del SP.

En la **Figura 1.3** se muestra un esquema de las diferentes características morfológicas. La fila (1) esquematiza a la orientación de los poros cuando a) están alineados con la fuente de poros y al plano preferencial (1 0 0), b) están aproximadamente alineados con la fuente de poros, c) están parcialmente alineados al plano preferencial (1 1 1) y a la fuente de poros y d) están alineados únicamente a (1 0 0). La fila (2) pertenece a la ramificación cuando a) las ramas

tienen paredes lisas, b) las ramas son más cortas que el diámetro, c) solo hay ramas de segundo nivel, d) las ramas son dendríticas, e) los poros principales están en las ramas de segundo y tercer nivel, f) las ramas son densas, aleatorias y cortas. La fila (3) pertenece al relleno de los macroporos cuando a) están vacíos con micro SP, b) están parcialmente llenos y c) están completamente llenos. La fila (4) corresponde a la variación de profundidad en la capa del SP cuando hay a) una sola capa de microporos, b) una sola capa de macroporos con poros más pequeños cerca de la superficie, c) una capa de microporos encima de macroporos (los poros se pueden llenar con microporos).

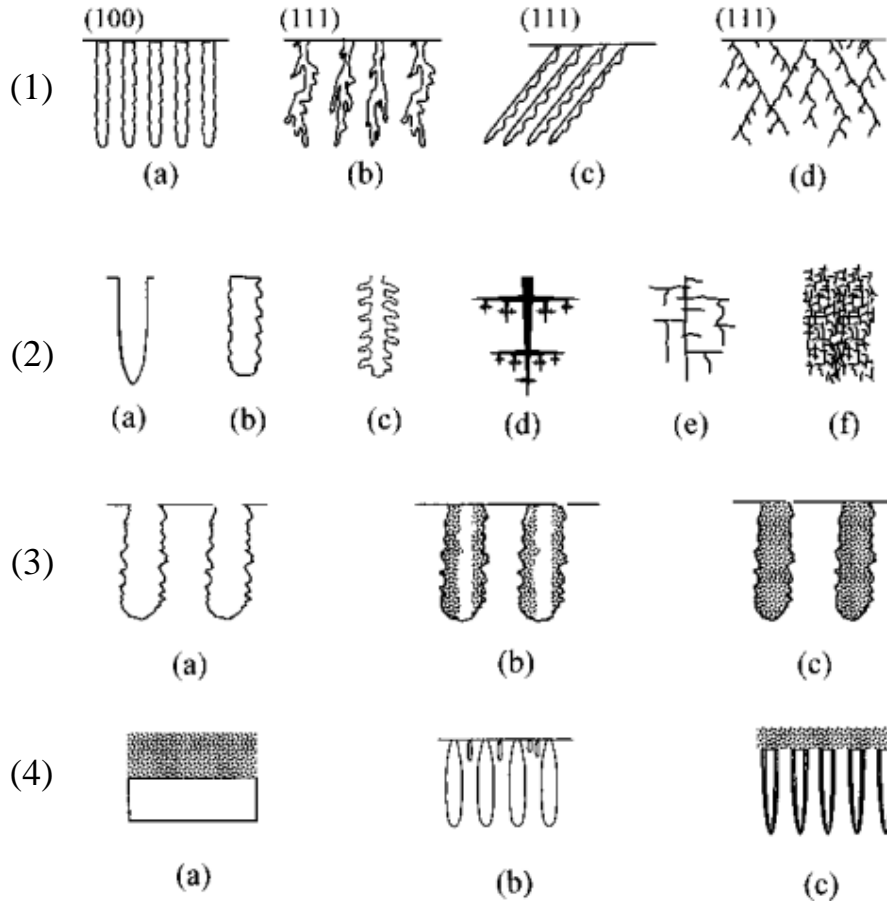


Figura 1.3. Esquemáticas morfológicas del silicio poroso [26].

1.2.5 Fotoluminiscencia

La fotoluminiscencia es una de las propiedades que han hecho del SP un material de interés científico. Esta propiedad depende, en gran medida, de la porosidad. La fotoluminiscencia se debe a los efectos de confinamiento [27]. En la **Figura 1.4** se muestra la relación del porcentaje de porosidad, la intensidad de fotoluminiscencia y la longitud de onda.

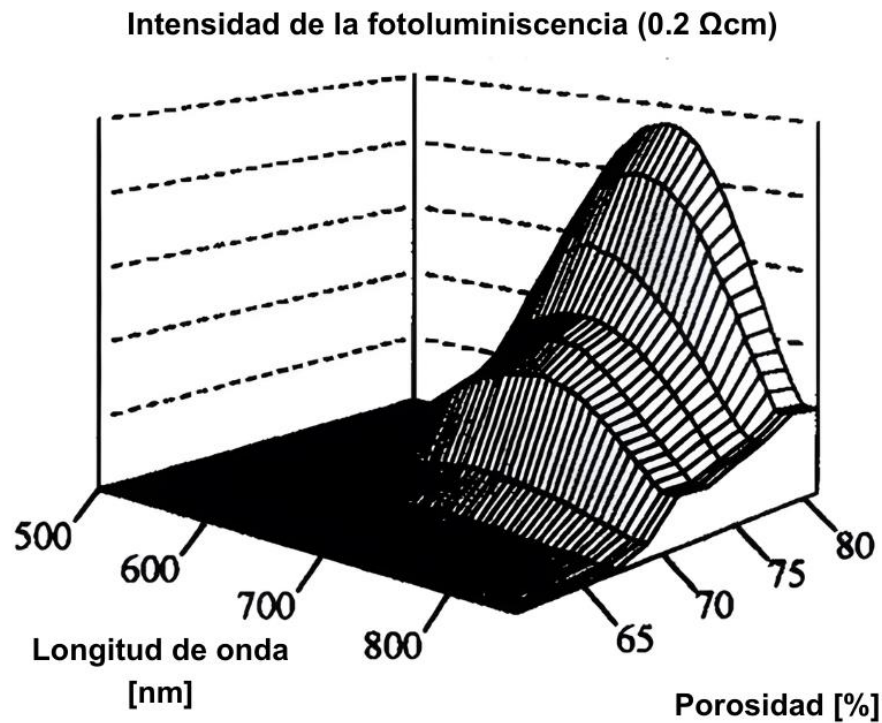


Figura 1.4. Espectros de fotoluminiscencia en silicio poroso con diversas porosidades [27].

1.3 Métodos de caracterización

Las técnicas de caracterización de materiales, tal como la microscopía eléctrica de barrido (SEM), la microscopía de fuerza atómica (AFM) y la difracción de rayos

X (XRD) son herramientas valiosas empleadas en el análisis de morfología, topografía y estructura atómica; siendo empleados en diferentes áreas científicas [28].

1.3.1 Difracción de Rayos X

La difracción de rayos X (XRD) es una herramienta importante que se ha utilizado durante el último siglo para el estudio de minerales, compuestos y materiales [29]. Este método de caracterización se utiliza ampliamente para la identificación de las fases presentes (análisis cualitativo) y para la determinación de sus respectivas cantidades (análisis cuantitativo) [30]. Con esta técnica se pueden obtener:

- Constantes de red
- Deformación
- Tamaño de cristal
- Densidad de dislocación
- Período de superredes

En la **Figura 1.5** se muestra un diagrama representativo del mecanismo del XRD.

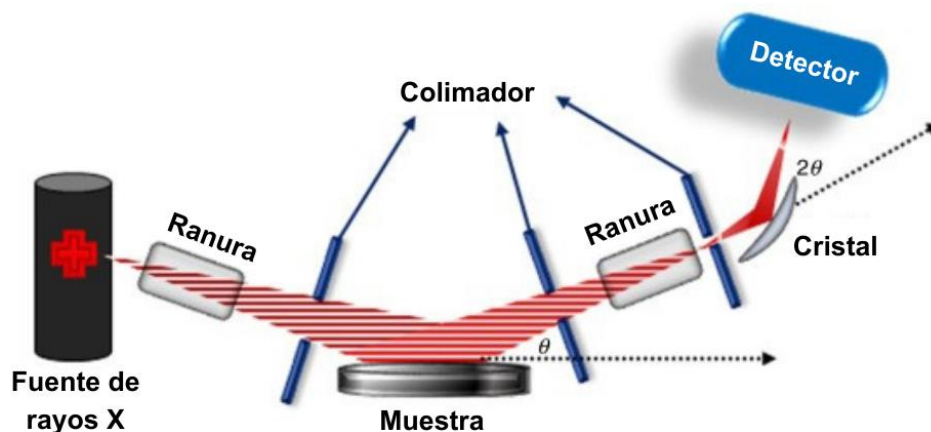


Figura 1.5. Esquema del mecanismo de un XRD [31].

1.3.2 Ley de Bragg

La ley de Bragg predice la condición en la que se da la interferencia constructiva entre haces de rayos x dispersados por un cristal [32]. La ecuación se expresa como:

$$n\lambda = 2d \operatorname{sen} \theta$$

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 1.6** se presenta un esquema de esta ley.

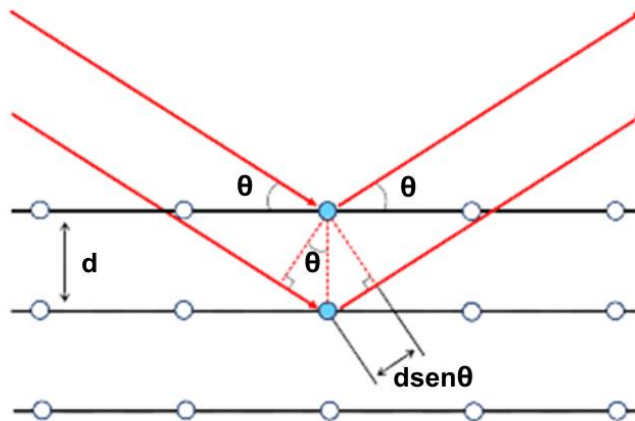


Figura 1.6. Diagrama de la ley de Bragg [33].

1.3.3 Microscopia electrónica de barrido (SEM)

La microscopía electrónica de barrido (SEM) explora la superficie de una muestra punto por punto. Una imagen SEM se forma mediante un haz de electrones enfocado que escanea la superficie de una muestra, no se forma mediante la iluminación instantánea de un campo completo como en el caso de un microscopio

electrónico de transmisión. [34]. 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 secundarios se emiten cuando el haz primario excita los átomos de la muestra [35].

Algunas características del SEM son [36]:

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

En la **Figura 1.7** se presenta un diagrama esquemático del mecanismo de un SEM.

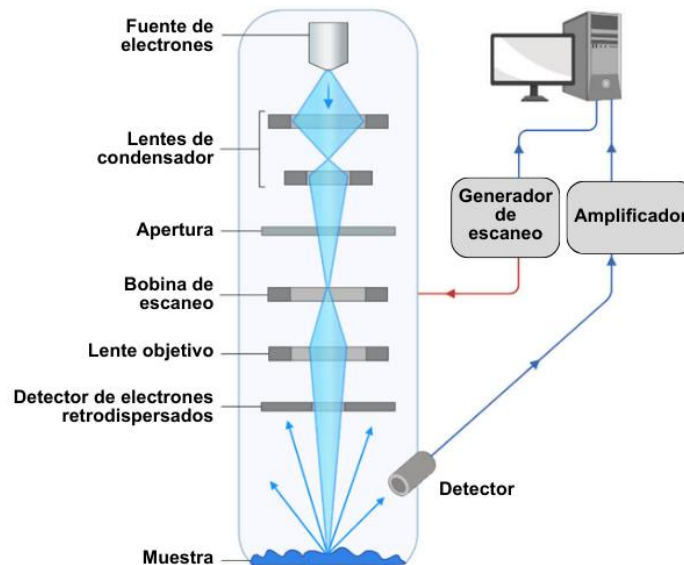


Figura 1.7. Esquema del mecanismo de un SEM [37].

1.3.4 Espectroscopia de rayos X de energía dispersa (EDS)

Es una técnica analítica que permite la caracterización elemental de materiales [38]. El proceso básico consiste en que una muestra es excitada por una fuente de energía (haz de electrones del SEM), cuando los electrones entran en contacto con una muestra, se desaceleran y la pérdida de energía de los electrones se emite como un fotón. Esos fotones tienen energías particulares para los elementos de la muestra, las cuales proporcionan al SEM los denominados rayos X característicos [39].

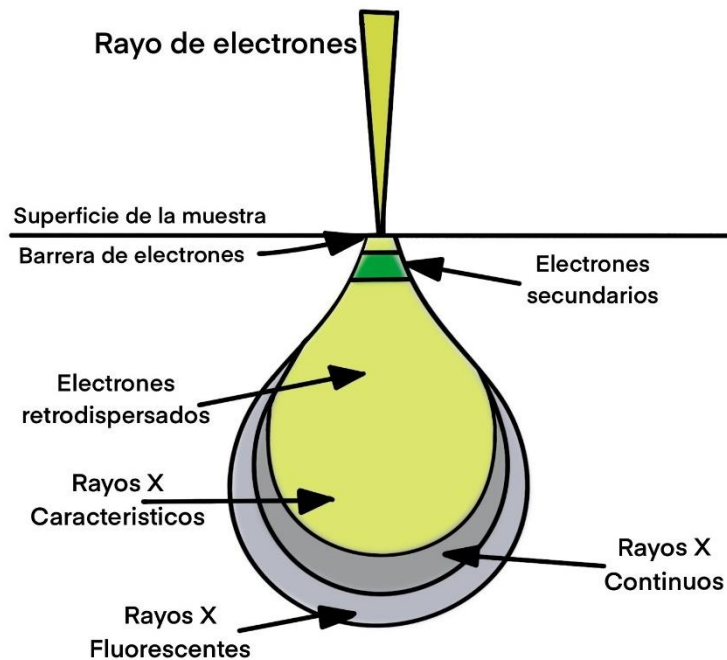


Figura 1.8. Interacción esquemática entre el haz de electrones y la muestra [40].

1.3.5 Microscopio de Fuerza Atómica (AFM)

El Microscopio de Fuerza Atómica es una técnica de caracterización que permite el análisis superficial de muestras con alta resolución; así como información de las propiedades mecánicas de un material. Esta herramienta cuenta con diversos modos de operación, algunos de ellos son: contacto, no contacto, *tapping*, entre otros [41]. En la **Figura 1.9** se muestra una representación del funcionamiento de los 3 modos más conocidos.

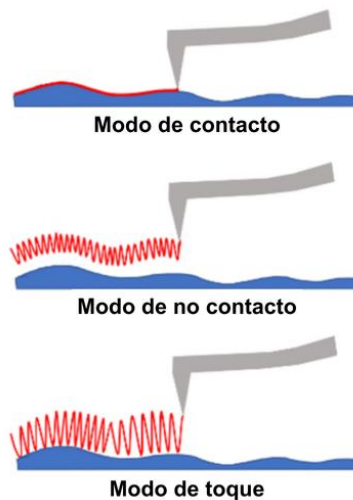


Figura 1.9. Diferentes modos de operación del AFM: Contacto, no contacto y tapping [42].

1.3.6 Espectroscopía Raman

La espectroscopía Raman es una técnica óptica de análisis químico no destructiva que proporciona información detallada sobre la estructura química, la fase y polimorfía, la cristalinidad y las interacciones moleculares [43].

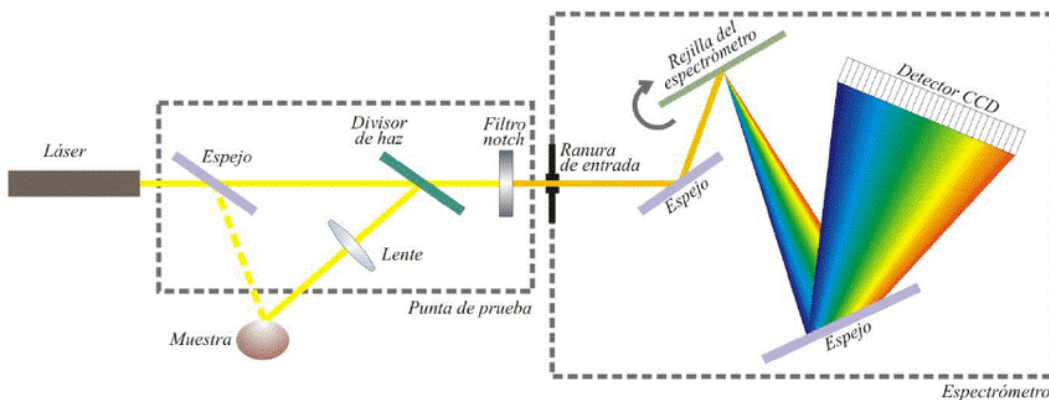


Figura 1.10. Esquema de la configuración de un espectroscopio Raman [44].

1.4 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 [45].

El campo de aplicación de la DM va desde superficies catalíticas hasta sistemas biológicos como las proteínas. Para realizar la modelación de los diferentes sistemas, la DM clásica integra las ecuaciones de movimiento de Newton para un conjunto de partículas que interactúan. Una sola partícula puede ser un átomo, una molécula o un electrón, un conjunto de átomos de grano grueso o un sistema a nivel mesoscópico o macroscópico del material [46].

1.4.1 Potencial interatómico

Los potenciales interatómicos son funciones matemáticas para calcular la energía potencial de un sistema de átomos con posiciones dadas en el espacio. Estos

potenciales se dividen en: fundamental y empírico. Los potenciales fundamentales dan una descripción precisa y realista del sistema. Este tipo de potenciales resultan ser bastante complejos de implementar, a no ser que se hagan aproximaciones, las cuales reducen la exactitud del resultado final. Incluso con estas aproximaciones, este tipo de potenciales resultan ser extraordinariamente costosos, hablando en términos de memoria y ciclos de CPU consumidos.

Por otra parte, los potenciales empíricos están limitados a ciertos sistemas los cuales no están completos ni son precisos; pero generalmente la descripción resulta suficientemente profunda para ser útil. 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.

1.4.2 Software

En la actualidad existen varios programas capaces de llevar a cabo las simulaciones de DM. Estos softwares se pueden utilizar para modelar sistemas atómicos, poliméricos, biológicos, sistemas metálicos, granulados, y de grano grueso usando una variedad de campos de fuerza y condiciones de contorno [47].

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)

El software que se eligió fue LAMMPS (Large-scale Atomic/Molecular Massively Parallel Simulator) ya que ofrece flexibilidad mediante una amplia gama de métodos de simulación, como dinámica molecular y Monte Carlo, y soporta numerosos modelos de potenciales. Además, al ser de código abierto y gratuito, elimina los costos de licencia.

1.5 Visualizador molecular

Los visualizadores moleculares fueron desarrollados con el objetivo de observar la geometría molecular y analizar las propiedades electrónicas, haciendo uso de los resultados en el cálculo computacional. Algunos ejemplos de visualizadores son [48]:

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

Para este trabajo se ha seleccionado Ovito (Open Visualization Tool), un software de código abierto para la visualización y el análisis científico de datos generados por simulaciones de dinámica molecular, Monte Carlo atómico y otros enfoques



CAPÍTULO 1 MARCO TEÓRICO



basados en partículas. Con Ovito, se ha podido realizar un análisis detallado de la estructura atómica, rugosidad de superficie y otras características relevantes.

REFERENCIAS DEL CAPÍTULO 1

- [1] K. Raidongia, A. T. L. Tan, and J. Huang, “Graphene Oxide: Some New Insights into an Old Material,” in *Carbon Nanotubes and Graphene*, Elsevier, 2014, pp. 341–374. doi: 10.1016/B978-0-08-098232-8.00014-0.
- [2] A. T. Dideikin and A. Y. Vul’, “Graphene Oxide and Derivatives: The Place in Graphene Family,” *Front Phys*, vol. 6, Jan. 2019, doi: 10.3389/fphy.2018.00149.
- [3] X. Wan, Y. Huang, and Y. Chen, “Focusing on Energy and Optoelectronic Applications: A Journey for Graphene and Graphene Oxide at Large Scale,” *Acc Chem Res*, vol. 45, no. 4, pp. 598–607, Apr. 2012, doi: 10.1021/ar200229q.
- [4] K. P. Loh, Q. Bao, G. Eda, and M. Chhowalla, “Graphene oxide as a chemically tunable platform for optical applications,” *Nat Chem*, vol. 2, no. 12, pp. 1015–1024, Dec. 2010, doi: 10.1038/nchem.907.
- [5] J. Liu, L. Cui, and D. Losic, “Graphene and graphene oxide as new nanocarriers for drug delivery applications,” *Acta Biomater*, vol. 9, no. 12, pp. 9243–9257, Dec. 2013, doi: 10.1016/j.actbio.2013.08.016.
- [6] Z. Bo *et al.*, “Green preparation of reduced graphene oxide for sensing and energy storage applications,” *Sci Rep*, vol. 4, no. 1, p. 4684, Apr. 2014, doi: 10.1038/srep04684.
- [7] C. Chung, Y.-K. Kim, D. Shin, S.-R. Ryoo, B. H. Hong, and D.-H. Min, “Biomedical Applications of Graphene and Graphene Oxide,” *Acc Chem Res*, vol. 46, no. 10, pp. 2211–2224, Oct. 2013, doi: 10.1021/ar300159f.
- [8] D. C. Marcano *et al.*, “Improved Synthesis of Graphene Oxide,” *ACS Nano*, vol. 4, no. 8, pp. 4806–4814, Aug. 2010, doi: 10.1021/nn1006368.
- [9] A. T. Smith, A. M. LaChance, S. Zeng, B. Liu, and L. Sun, “Synthesis, properties, and applications of graphene oxide/reduced graphene oxide and their nanocomposites,” *Nano Materials Science*, vol. 1, no. 1, pp. 31–47, Mar. 2019, doi: 10.1016/j.nanoms.2019.02.004.
- [10] P. P. Brisebois and M. Siaj, “Harvesting graphene oxide – years 1859 to 2019: a review of its structure, synthesis, properties and exfoliation,” *J Mater Chem C Mater*, vol. 8, no. 5, pp. 1517–1547, 2020, doi: 10.1039/C9TC03251G.

- [11] Y. Zhu *et al.*, “Graphene and Graphene Oxide: Synthesis, Properties, and Applications,” *Advanced Materials*, vol. 22, no. 35, pp. 3906–3924, Sep. 2010, doi: 10.1002/adma.201001068.
- [12] U. Nogal *et al.*, “Silicio poroso, elaboración, formación y aplicaciones”, [Online]. Available: <http://www.lajpe.org>
- [13] M. J. Sailor, *Porous Silicon in Practice: Preparation, Characterization and Applications*, Ilustrada. 2012.
- [14] H. Föll, M. Christophersen, J. Carstensen, and G. Hasse, “Formation and application of porous silicon,” *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 39, no. 4, pp. 93–141, Nov. 2002, doi: 10.1016/S0927-796X(02)00090-6.
- [15] L. Canham, *Handbook of Porous Silicon*. Springer International Publishing, 2018. doi: 10.1007/978-3-319-71381-6.
- [16] R. Suryana, D. K. Sandi, and O. Nakatsuka, “The morphological study of porous silicon formed by electrochemical anodization method,” *IOP Conf Ser Mater Sci Eng*, vol. 333, p. 012034, Mar. 2018, doi: 10.1088/1757-899X/333/1/012034.
- [17] K. W. Kolasinski, “Porous Silicon Formation by Galvanic Etching,” in *Handbook of Porous Silicon*, Cham: Springer International Publishing, 2018, pp. 25–37. doi: 10.1007/978-3-319-71381-6_3.
- [18] É. Vázquez *et al.*, “Porous silicon formation by stain etching,” *Thin Solid Films*, vol. 388, no. 1–2, 2001, doi: 10.1016/S0040-6090(00)01816-2.
- [19] S. Adachi, “Porous Silicon Formation by Photoetching,” in *Handbook of Porous Silicon*, Cham: Springer International Publishing, 2018, pp. 79–87. doi: 10.1007/978-3-319-71381-6_6.
- [20] M. Ben Rabha, M. F. Boujmil, M. Saadoun, and B. Bessaïs, “Chemical vapour etching-based porous silicon and grooving: Application in silicon solar cells processing,” *physica status solidi (c)*, vol. 2, no. 9, pp. 3505–3509, Jun. 2005, doi: 10.1002/pssc.200461237.
- [21] K. L. Jarvis, T. J. Barnes, and C. A. Prestidge, “Surface chemistry of porous silicon and implications for drug encapsulation and delivery applications,” *Adv Colloid Interface Sci*, vol. 175, pp. 25–38, Jul. 2012, doi: 10.1016/j.cis.2012.03.006.



- [22] J. A. Guerra Contreras, “Silicio poroso: Desde su producción hasta su aplicación como sistema de liberación controlada de fármacos,” Universidad de Guanajuato, 2018.
- [23] M. J. Sailor, *Porous Silicon in Practice: Preparation, Characterization and Applications*, Ilustrada. 2012.
- [24] H. Föll, M. Christophersen, J. Carstensen, and G. Hasse, “Formation and application of porous silicon,” *Materials Science and Engineering: R: Reports*, vol. 39, no. 4, pp. 93–141, Nov. 2002, doi: 10.1016/S0927-796X(02)00090-6.
- [25] S. M. Haidary, E. P. Córcoles, and N. K. Ali, “Nanoporous Silicon as Drug Delivery Systems for Cancer Therapies,” *J Nanomater*, vol. 2012, pp. 1–15, 2012, doi: 10.1155/2012/830503.
- [26] X. G. Zhang, “Morphology and Formation Mechanisms of Porous Silicon,” *J Electrochem Soc*, vol. 151, no. 1, p. C69, 2004, doi: 10.1149/1.1632477.
- [27] W. Theiß, “Optical properties of porous silicon,” *Surf Sci Rep*, vol. 29, no. 3–4, pp. 91–192, Jan. 1997, doi: 10.1016/S0167-5729(96)00012-X.
- [28] K. Brübner, “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 Educations*, vol. 23, no. 1–3, pp. 105–111, 2001.
- [29] M. E. Aparicio Ceja and G. G. Carbajal Arizaga, “Utilidad de la difracción de rayos x en las nanociencias,” *Mundo nano*, vol. 3, no. 2, pp. 62–72, 2010.
- [30] J. Epp, “X-ray diffraction (XRD) techniques for materials characterization,” in *Materials Characterization Using Nondestructive Evaluation (NDE) Methods*, Elsevier, 2016, pp. 81–124. doi: 10.1016/B978-0-08-100040-3.00004-3.
- [31] M. Gumustas, C. T. Sengel-Turk, A. Gumustas, S. A. Ozkan, and B. Uslu, “Effect of Polymer-Based Nanoparticles on the Assay of Antimicrobial Drug Delivery Systems,” in *Multifunctional Systems for Combined Delivery, Biosensing and Diagnostics*, Elsevier, 2017, pp. 67–108. doi: 10.1016/B978-0-323-52725-5.00005-8.
- [32] F. Triviño Vázquez, “Difracción de rayos X. Aplicaciones a la calidad en construcción,” *Materiales de Construcción*, vol. 24, no. 155, pp. 63–84, Sep. 1974, doi: 10.3989/mc.1974.v24.i155.1311.

- [33] L. R. B. Elton and D. F. Jackson, “X-Ray Diffraction and the Bragg Law,” *Am J Phys*, vol. 34, no. 11, pp. 1036–1038, Nov. 1966, doi: 10.1119/1.1972439.
- [34] B. Dery and L. Zaixiang, “Scanning Electron Microscopy (SEM) as an Effective Tool for Determining the Morphology and Mechanism of Action of Functional Ingredients,” *Food Reviews International*, vol. 39, no. 4, pp. 2007–2026, May 2023, doi: 10.1080/87559129.2021.1939368.
- [35] Y. Leng, *Materials Characterization: Introduction to Microscopic and Spectroscopic Methods*, 2nd ed. 2013.
- [36] J. Renau-Piqueras and M. Faura, “Principios básicos del microscopio electrónico de barrido,” 1994.
- [37] F. Mokobi, “Scanning Electron Microscope (SEM)- Definition, Principle, Parts, Images,” *Microbe Notes*.
- [38] “Análisis elemental EDS,” Thermo Fisher Scientific.
- [39] A. Mohammed and A. Abdullah, “Scanning electron microscopy (SEM): A review,” in *Proceedings of the 2018 International Conference on Hydraulics and Pneumatics*, Băile Govora, Nov. 2018, pp. 7–9.
- [40] R. Zhang and B. D. Ulery, “Synthetic Vaccine Characterization and Design,” *Journal of Bionanoscience*, vol. 12, no. 1, pp. 1–11, Feb. 2018, doi: 10.1166/jbns.2018.1498.
- [41] A. García and K. Kikut Cruz, “Microscopía de fuerza atómica como herramienta en la investigación de asfaltos,” *Infraestructura Vial*, vol. 22, no. 40, pp. 20–27, Dec. 2020, doi: 10.15517/iv.v22i40.42057.
- [42] R. Asmatulu and W. S. Khan, “Characterization of electrospun nanofibers,” in *Synthesis and Applications of Electrospun Nanofibers*, Elsevier, 2019, pp. 257–281. doi: 10.1016/B978-0-12-813914-1.00013-4.
- [43] L. A. K. Staveley, *The Characterization of Chemical Purity: Organic Compounds*. Elsevier, 2016.
- [44] J. Castro Ramos, “Raman spectroscopy and its applications,” *Optica Pura y Aplicada*, vol. 46, no. 1, pp. 83–95, Mar. 2013, doi: 10.7149/OPA.46.1.83.



- [45] T. González García, “Diseño de potenciales externos para inducir el plegamiento de proteínas en dinámica molecular,” Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad de México, 2018.
- [46] T. Hansson, C. Oostenbrink, and W. van Gunsteren, “Molecular dynamics simulations,” *Curr Opin Struct Biol*, vol. 12, no. 2, pp. 190–196, Apr. 2002, doi: 10.1016/S0959-440X(02)00308-1.
- [47] B. Leimkuhler and C. Matthews, *Molecular Dynamics: With Deterministic and Stochastic Numerical Methods*. Alemania, 2018.
- [48] C. Torres Quezada, P. Varela Gangas, M. V. Frías, and P. Flores-Morales, “Implementación de Avogadro como visualizador y constructor de moléculas con alumnos de primer año de Odontología en la asignatura Química General y Orgánica,” *Educación Química*, vol. 28, no. 2, pp. 91–98, Apr. 2017, doi: 10.1016/j.eq.2016.08.004.

CAPÍTULO 2 DESARROLLO METODOLÓGICO

2.1 Óxido de Grafeno

Para obtener el OG se utilizó el Método de Hummers mejorado, en el cual, se emplea polvo de grafito (GF) como material de partida. Para realizar la síntesis, se mezclaron 30 ml de ácido sulfúrico (H_2SO_4) y 3.3 de ácido fosfórico (H_3PO_4) con 1 g de GF y 6 de permanganato de potasio (KMnO_4) durante 45 minutos. La mezcla se mantuvo en un baño térmico para controlar la temperatura en un rango de 35 – 40 °C. Finalmente, se le agregaron 10 de agua desionizada y 10 de peróxido de hidrógeno (H_2O_2) para detener la reacción [1].

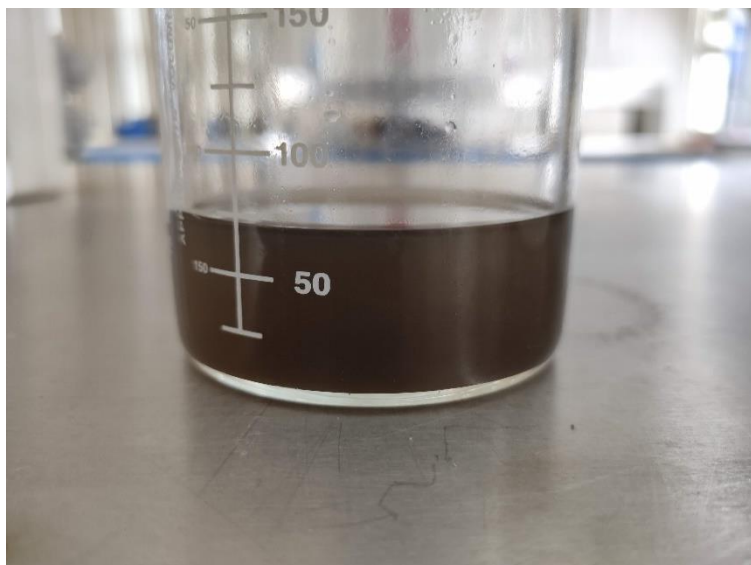


Figura 2.1. GO obtenido con el método de Hummers mejorado.

2.2 Obtención del silicio poroso

Se emplearon obleas de cSi tipo p (1 0 0) con una resistividad de 0.01-0.02 Ω cm. Para obtener los valores como densidad de poros, densidad corriente y velocidad de ataque, se realizaron diferentes muestras de SP. Las muestras obtenidas se caracterizaron mediante gravimetría [1], obteniendo las relaciones de porosidad y velocidad de ataque en función de la densidad de corriente aplicada. A partir de estas relaciones, es posible determinar las condiciones experimentales que permiten la obtención del SP con las características de porosidad y espesor de capa porosa.

En la **Figura 2.2** se muestra una fotografía del SP obtenido con el proceso de anodización.

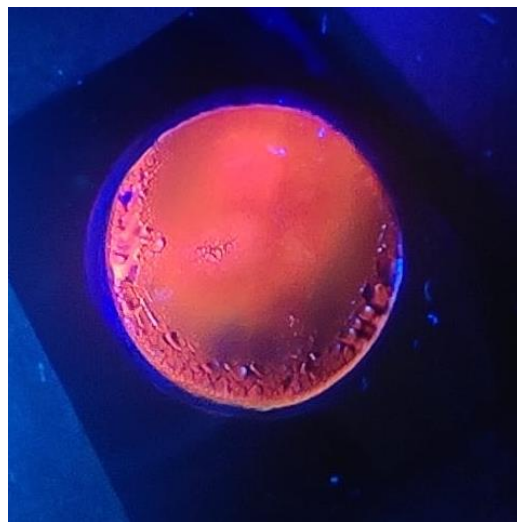


Figura 2.2. Fotografía del SP bajo luz UV.

2.2.1 Celda de anodización

La celda de anodización es un dispositivo construido con un material resistente a ácidos, además de un cátodo y ánodo por el cual circulará la corriente eléctrica. En este proyecto se utilizó una celda de teflón con un o-ring para garantizar un correcto sellado; como cátodo se empleó un filamento de tungsteno y una base de aluminio para el ánodo. En la **Figura 2.3** se muestra un esquema de la celda de anodización junto con los elementos que la componen.

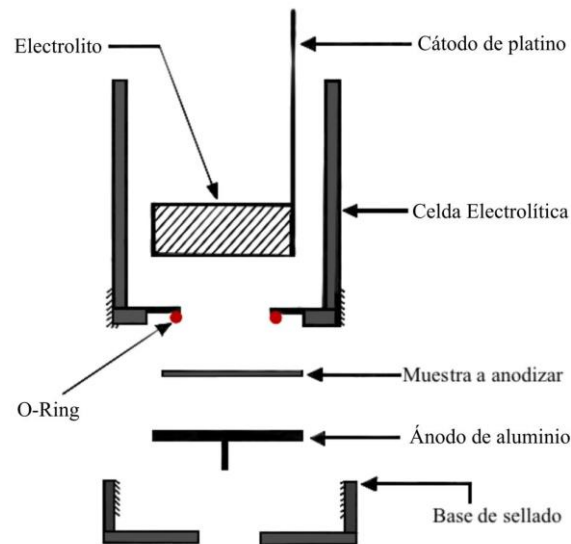


Figura 2.3. Esquema de una celda de anodización vista de perfil [2].

2.2.3 Fuente de alimentación

En este proyecto se utilizó una fuente de alimentación modelo 2231A-30-3 de la marca Keithley (**Figura 2.4**). Este equipo suministra una potencia total de 195 W.



Figura 2.4. Fuente de alimentación utilizada en este proyecto.

2.3 Métodos de caracterización

2.3.1 Caracterización por difracción de rayos X

El equipo utilizado es un difractómetro de rayos X (XRD) marca Rigaku modelo Ultima IV con radiación Cu – K α (K α = 1.5418 Å). Se empleó una configuración Bragg–Brentano operando a 44 kV y 20 mA para adquirir patrones de difracción a lo largo de 5 – 90° en pasos de 0.02° por minuto. En la **Figura 2.5** se muestra el difractómetro utilizado.



Figura 2.5. Difractómetro de Rayos X Rigaku Ultima IV.

2.3.2 Caracterización por microscopía electrónica de barrido

El equipo utilizado para obtener las imágenes fue un Microscopio Electrónico de Barrido (SEM) de marca JEOL, modelo JSM 6010LA (**Figura 2.6**) equipado con un analizador EDS expandido totalmente integrado; el cual se encuentra en el Instituto Tecnológico de Estudios Superiores del Occidente (ITESO), en la ciudad de Guadalajara, Jalisco.



Figura 2.6. SEM marca JEOL modelo JSM 6010LA.

2.3.3 Caracterización por espectroscopia de rayos X de energía dispersa

El SEM marca JEOL, modelo JSM 6010LA cuenta con un analizador EDS por lo tanto, este mismo equipo se utilizó para realizar la caracterización por espectroscopía de rayos X de energía dispersa.

2.3.4 Caracterización por microscopía de fuerza atómica

El equipo empleado para obtener esta caracterización es un microscopio de fuerza atómica (AFM) de Park Systems, modelo XE7. Las mediciones se hicieron en modo no contacto en área $50\ \mu\text{m}$, $10\ \mu\text{m}$, $3\ \mu\text{m}$ y $0.5\ \mu\text{m}$.

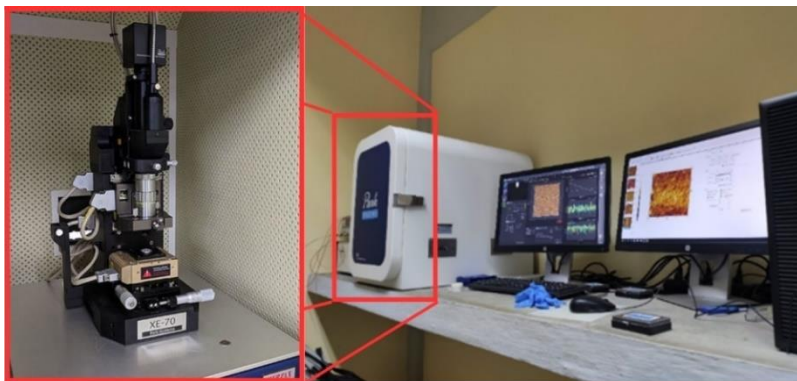


Figura 2.7. AFM Park Systems modelo Park XE7.

2.3.5 Caracterización por espectroscopia Raman

Para realizar las mediciones de espectroscopia Raman se utilizó un sistema Raman Horiba Jobin HR 800 con una fuente de excitación HeNe a $632\ \text{nm}$ y $50\ \text{mW}$ de potencia. Este equipo se encuentra en el ITESO.



Figura 2.8. Espectroscopia Raman Horiba modelo Jobin HR 800.



2.4 Simulación computacional

Se utilizó LAMMPS para realizar las simulaciones de DM. Los resultados numéricos obtenidos por LAMMPS se procesaron y analizaron con la versión gratuita del OVITO. El análisis morfológico se realizó utilizando el modificador “Create bonds” el crea nuevos enlaces entre pares de partículas según un criterio basado en la distancia; además, se utilizó el modificador “Construct surface mesh”, el cual genera una malla geométrica que describe los límites externos e internos de una estructura atómica.

Para la realización de los modelos se utilizaron unidades metálicas (units metal); dimensiones tridimensionales (3D); condiciones de frontera periódicas para los ejes x y y , para el eje z se utilizó un estilo no periódico (boundary p p f) debido a que sobre esta dirección es donde se realizará el depósito de los átomos. Por último, se colocó un estilo de átomo del tipo atómico (atom_style atomic).

2.4.1 Potencial interatómico

Se utilizó el potencial de Tersoff para modelar silicio cristalino, sustratos de matriz porosa y la nucleación compuesta de C–Si. Se eligió este potencial debido a que permite la descripción precisa de simulaciones atomísticas con un gran espacio de configuración, lo que genera una comprensión integral de las interacciones y propiedades de los sistemas OG/mSP. En la **Tabla 3** se presentan los parámetros relacionados del potencial de Tersoff utilizados para las interacciones, con unidades de energía en eV y unidades de longitud en Å.

Tabla 3. Parámetros del potencial de Tersoff para SiC.

Parámetro	Si-Si	C-C	Si-C
D_0	3.24	6.0	4.36
r_0	2.232	1.4276	1.79
S	1.842	2.167	1.847
β	1.4761	2.0099	1.6991
γ	0.114354	0.11233	0.011877
c	2.00494	181.910	273987
d	0.81472	6.28433	180.314
h	0.259	0.5556	0.68
2μ	0.0	0.0	0.0
R	2.82	2.0	2.40
D	0.14	0.15	0.20

2.4.2 Condiciones de la región porosa

Primero, se construyó un sustrato de cSi para recrear las condiciones experimentales (fabricación de la mSP), con 54,31 Å en las direcciones x , y , y z . Luego, se definió un área de cSi con un espesor de 54.31 Å \times 54.31 Å y 21.72 Å, utilizando un conjunto canónico, en el cual número de partículas, volumen y temperatura (NVT) son declarados. El resto del sustrato (32.59 Å en la dirección z) se utilizó para construir la región porosa. Los poros se hicieron extrayendo átomos de silicio de forma aleatoria. La región porosa se dividió en tres zonas para reproducir la morfología experimental, donde el diámetro de los poros es menor en la parte inferior y aumenta a medida que avanza el grabado. Las zonas de la mSP se etiquetaron como a) una zona inferior que consta de 483 átomos para



representar las capas más cercanas al sustrato de c-Si, b) una zona media con 338 átomos para representar la mitad de la capa porosa, y c) una zona superior con 315 átomos para representar las capas cercanas a la superficie.

2.4.3 Condiciones de frontera

Las condiciones de frontera se establecieron periódicamente para las direcciones x y y ; mientras tanto, el volumen de simulación se fijó para mantener una red de masa constante para preservar el silicio cristalino y las zonas porosas. Se estableció una condición de borde no periódica (condición libre) para la dirección z para llevar a cabo la funcionalización del carbono en las zonas porosas.

2.4.4 Funcionalización de zonas porosas

Se inyectaron átomos de carbono en la mSP para reproducir la infiltración experimental de OG y estudiar la nucleación del compuesto C-Si. Los átomos de C se expulsaron de una región previamente creada ubicada en la parte superior del cuadro de simulación. En el modelo de la mSP se inyectó con 500, 1,000 y 2,000 átomos de C utilizando una velocidad de depósito de 5.92 \AA/ps la cual se obtuvo despejando la ecuación de la energía total del átomo. Se depositó un solo átomo de C cada 10 pasos de tiempo, este criterio fue el mismo para todas las pruebas; después de cada depósito, se agregaron pasos de tiempo para alcanzar un estado estable; se utilizaron un total de 80,000 pasos de tiempo en cada prueba. Las condiciones de simulación se configuraron para replicar el procedimiento



CAPÍTULO 2 DESARROLLO METODOLÓGICO



experimental, donde la fuente de carbono se agrega 10 minutos después del grabado en la parte superior de las capas porosas formadas a lo largo de ese tiempo.



REFERENCIAS DEL CAPÍTULO 2

- [1] D.C. Marcano, D. V. Kosynkin, J.M. Berlin, A. Sinitskii, Z. Sun, A. Slesarev, L.B. Alemany, W. Lu, J.M. Tour, Improved Synthesis of Graphene Oxide, *ACS Nano* 4 (2010) 4806–4814. <https://doi.org/10.1021/nn1006368>.
- [2] F.S. Ramírez-González, Obtención y caracterización de sensores de etanol basados en silicio poroso y cristalino tipo p y n, Benemérita Universidad Autónoma de Puebla, 2013.

CAPÍTULO 3 RESULTADOS Y DISCUSIÓN

3.1 Resultados experimentales

3.1.1 Caracterización de rayos X

En la **Figura 3.1** se muestra el difractograma del OG dispersado con etanol. En esta gráfica se puede observar el plano preferencial (0 0 1) ubicado en $2\theta = 9.82^\circ$. Por otro lado, tenemos el plano preferencial (0 0 2) ubicado en $2\theta = 42.28^\circ$. Este plano corresponde al GF y su baja intensidad indica una oxidación, dando paso a la formación de óxido de grafeno.

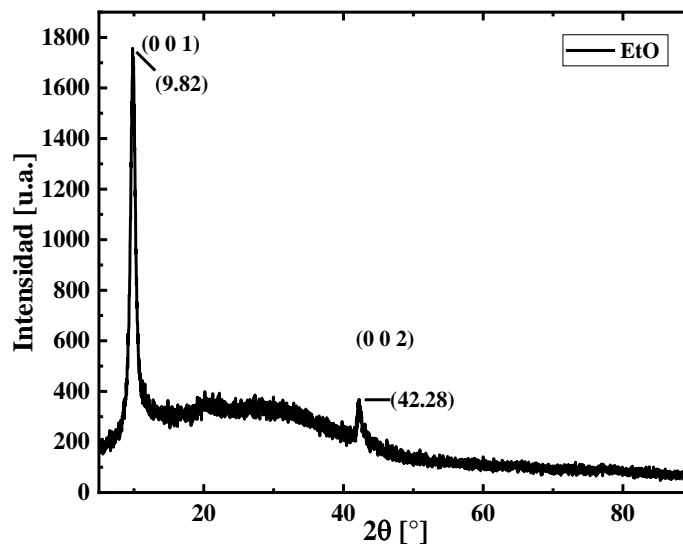


Figura 3.1. Patrón de difracción del OG.

En la **Figura 3.2**, se muestran los patrones de difracción de la mSP y la mSP funcionalizada con óxido de grafeno. La **Figura 3.2a** muestra el patrón de difracción de la mSP, donde el pico $\sim 69^\circ$ corresponde al silicio poroso. La **Figura**

3.2b muestra el patrón de difracción de la mSP funcionalizada; los picos a 28.3° , 47.3° y 56.1° corresponden al Si con (1 1 1), (2 2 0) y (3 1 1), respectivamente. La presencia de estos picos y su ensanchamiento se atribuyen a la presencia de compuestos de carbono-silicio, debido a la funcionalización [1], [2].

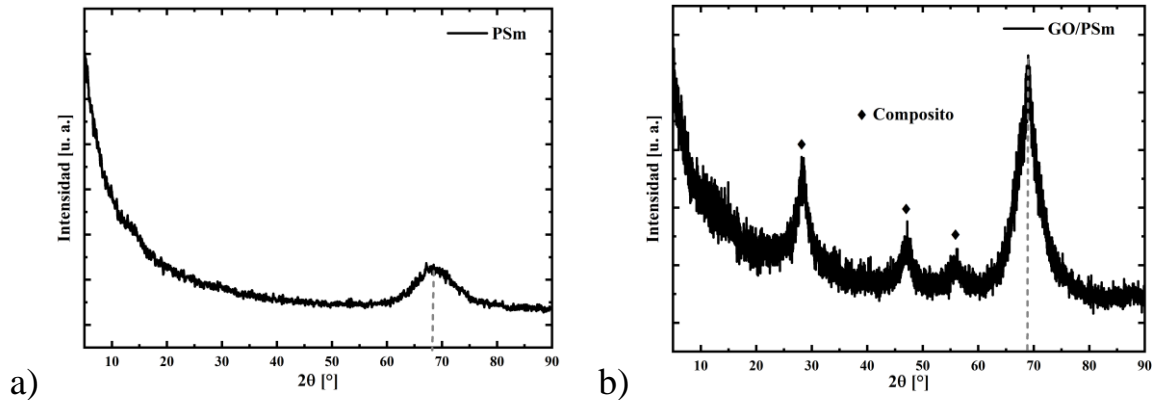


Figura 3.2. Patrones de difracción a) Matriz de silicio poroso (mSP), y b) mSP funcionalizada con átomos de C.

3.1.2 Caracterización por microscopía electrónica de barrido

A continuación, en la **Figura 3.3**, se muestra una imagen SEM del SP fabricado con una densidad de corriente de 77.38 mA/cm^2 , esta microscopía se realizó de forma transversal para lograr apreciar los filamentos formados. En la imagen se logra apreciar una formación de poros cuando están parcialmente alineados al plano preferencial y a la fuente de poros (Ver **Figura 1.3**).

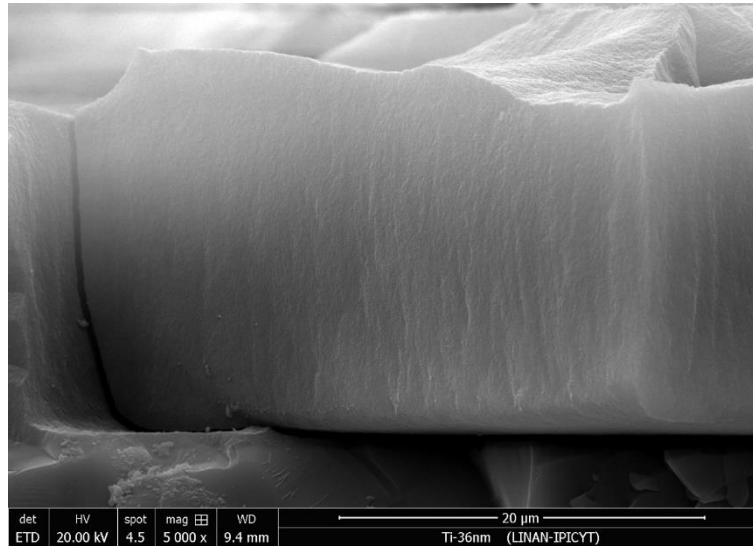


Figura 3.3. Micrografía SEM lateral del SP.

3.1.3 Caracterización por espectroscopia de dispersión de energía

Se obtuvo un mapeo elemental mediante espectroscopia de dispersión de energía (EDS) transversal a la superficie del SP. En la **Figura 3.4**, el cSi se encuentra en la parte inferior, debajo de la zona más clara. La capa porosa y el nivel de vacío se encuentran en la parte superior. Por otro lado, es posible observar una línea oscura cercana al nivel de vacío en el mapeo de Si, esta línea nos indica que la densidad de los átomos de C es mayor, siendo congruente con los valores presentados en la **Tabla 6**. En el mapeo del C se puede observar que hay una mayor densidad de poros en la parte superior de la matriz y va disminuyendo conforme el ataque penetra el SP. Al correlacionar XRD y EDS, se propone que se formó un compuesto de carbono-silicio en el SP, donde los aglomerados de silicio están cubiertos con átomos de C.

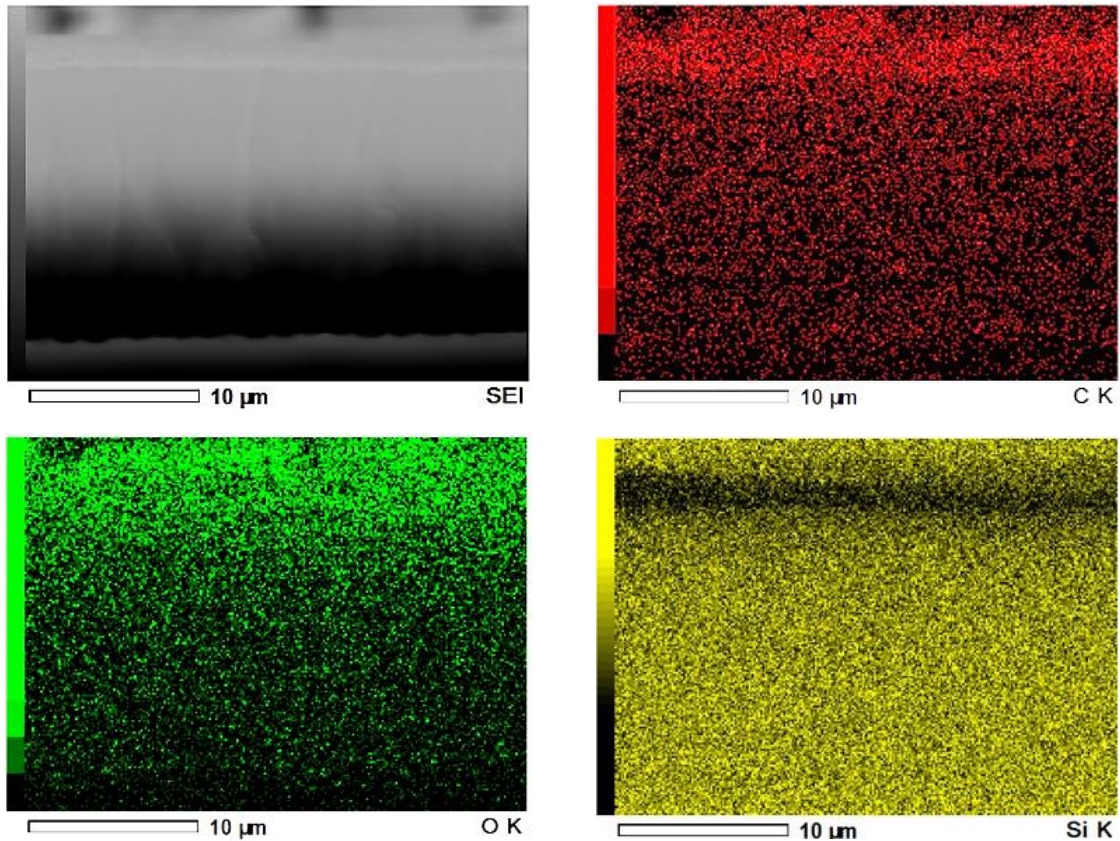


Figura 3.4. Mapeo EDS transversal del SP funcionalizado donde se mapean C, O y Si.

3.1.4 Caracterización por microscopio de fuerza atómica

La **Figura 3.5a** corresponde a una imagen AFM del SP con dimensiones de 50 x 50 μm , donde se observan macroporos distribuidos aleatoriamente; por medio del software XEI, se calcularon los diámetros, dando un promedio de $\sim 2 \mu\text{m}$. En la **Figura 3.5b** se muestra el SP funcionalizado, en esta imagen se puede observar que los poros no se bloquean durante la funcionalización, pero disminuyen.

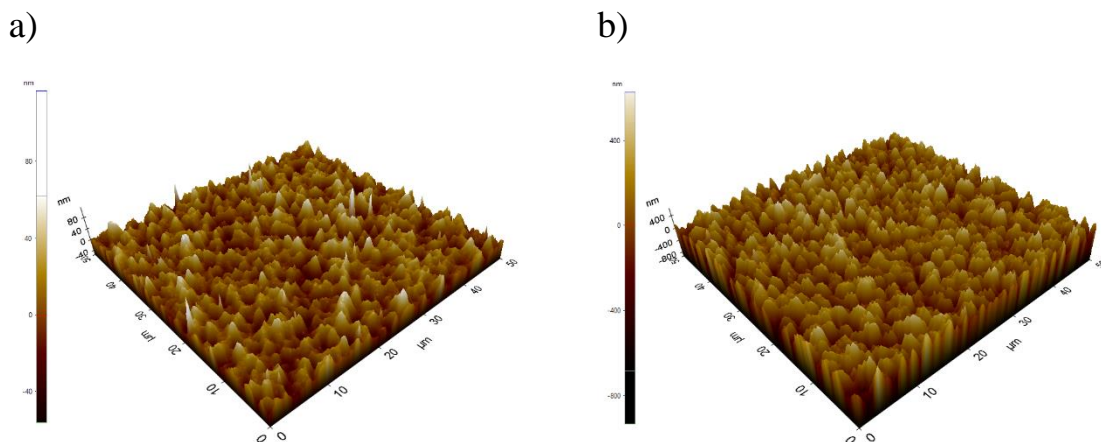


Figura 3.5. Imágenes AFM a) SP y b) SP funcionalizado con carbono.

3.1.5 Caracterización por espectroscopia Raman

En este tipo de caracterización podemos obtener información detallada sobre la composición de los enlaces químicos. En la **Figura 3.6** se pueden apreciar las bandas D y G, las cuales se encuentran en la posición 1359.15 cm^{-1} y 1605.49 cm^{-1} , respectivamente. La banda D corresponde al desorden, mientras que la banda G corresponde al grafeno, la relación entre estas bandas nos ayuda a determinar la calidad del material que se obtuvo.

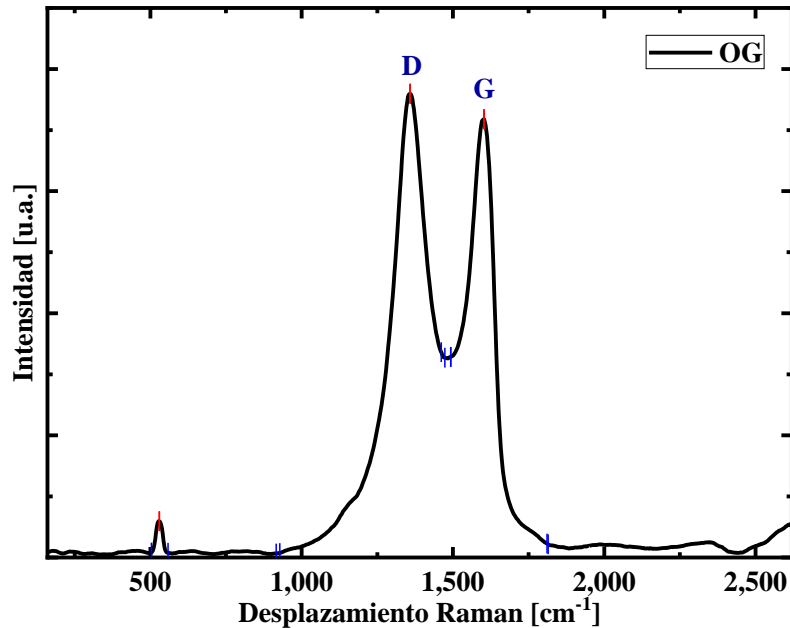


Figura 3.6. Espectroscopía Raman.

3.2 Resultados de simulación

A continuación, se discuten los resultados derivados de la aplicación de la Dinámica Molecular a los modelos computacionales de la funcionalización de la mSP con átomos de carbono. Cabe mencionar que estos resultados fueron punto clave para realizar la publicación de un artículo científico en la revista Computational Materials Science.

3.2.1 Matriz de silicio poroso

En la **Figura 3.7** se presentan los modelos obtenidos de la mSP mediante DM. La **Figura 3.7a** presenta el sustrato de cSi antes del ataque electroquímico, mientras que la **Figura 3.7b** muestra la mSP con tres zonas porosas en el cSi: la malla azul

oscuro, medio y claro corresponden a las regiones inferior, media y superior con una porosidad de 70, 75 y 80 %, respectivamente. En la **Tabla 4** se presenta un resumen del espesor de la mSP y el porcentaje de porosidad utilizados en las simulaciones.

Tabla 4. Zonas de espesor y porcentajes de porosidad de la mSP.

Zona	Espesor [Å]	Porosidad [%]
Inferior	21.72 – 32.58	70
Media	32.58 – 43.44	75
Superior	43.44 – 54.31	80

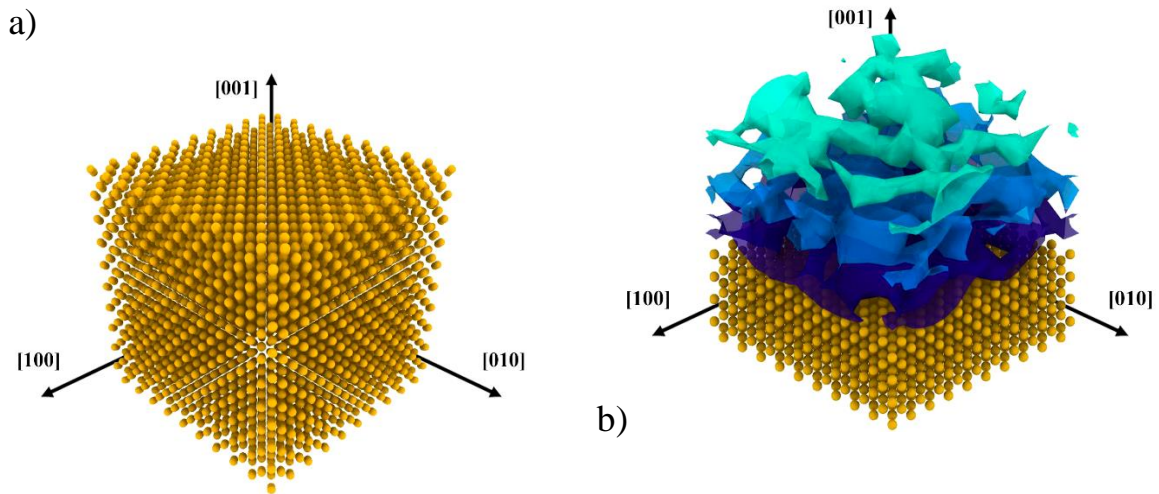


Figura 3.7. Visualización de los resultados de simulación: a) Silicio cristalino (cSi), y b) tres zonas porosas sobre el cSi. Puntos amarillos = átomos de Si, malla azul oscuro = zona inferior, malla azul medio = zona media, y malla azul claro = zona superior.

En OVITO se realizaron los arreglos de una malla superficial y una construcción de malla para así obtener una imagen comparativa con los resultados del AFM. En la **Figura 3.8** se puede observar el resultado de los arreglos previamente mencionados, el cual corresponde a una muestra de la mSP con dimensiones de

543.1 Å; aproximándonos a los resultados experimentales. La concentración de poros en las esquinas nos indica que existe una periodicidad en la simulación.

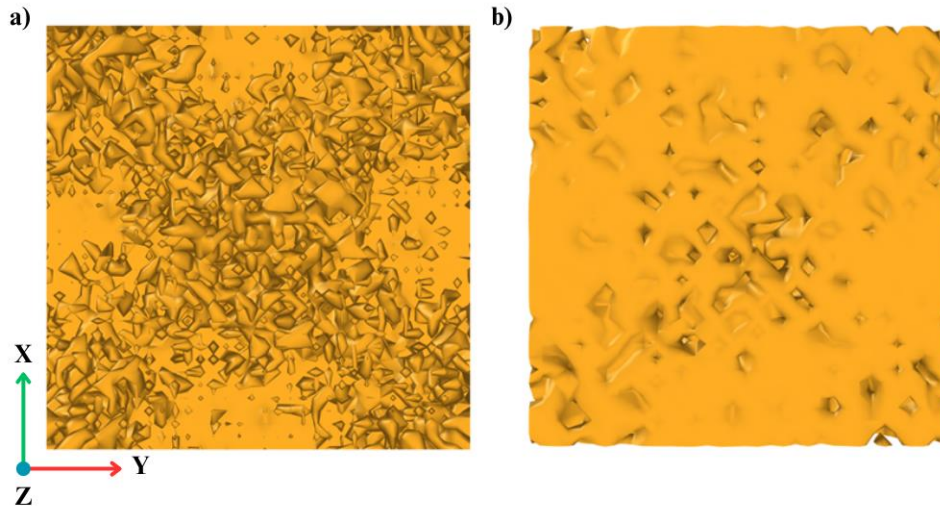


Figura 3.8. Malla superficial de la simulación de la mSP, donde a) es una vista superior y b) es una vista de la interfaz entre la mSP y el cSi.

En la **Figura 3.9** se puede observar la textura superficial piramidal del cSi. Este tipo de textura se debe al control de la morfología de la superficie mediante electrolisis; además, se ha reportado que esta texturización se puede utilizar para mejorar la absorción de luz dentro de los sustratos de silicio [3].

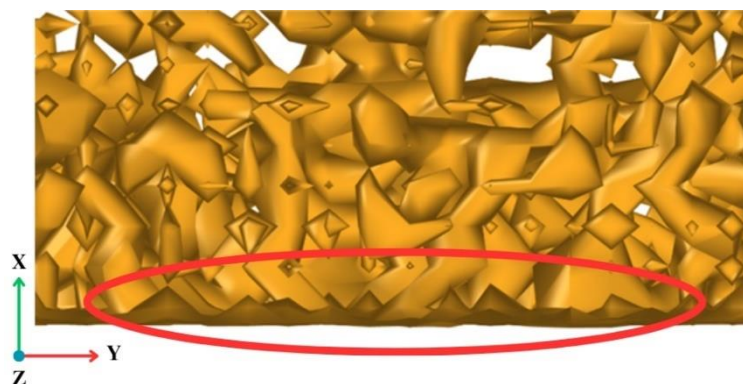


Figura 3.9. Acercamiento de la mSP donde se observa la textura piramidal del cSi.

3.2.2 Funcionalización de la matriz de silicio poroso

El modelo de MSP funcionalizado con carbono se realizó con tres proporciones de carbono para realizar el análisis de la estructura. Estas variaciones se realizaron con valores de 500, 1,000, y 2,000 átomos, de los cuales se depositaron 75, 120 y 201, respectivamente. En la **Tabla 5** se puede ver el resumen del tipo y número de átomo de la simulación.

Tabla 5. Átomos de carbono inyectados en el modelo de la mSP.

Número de átomos		
Si (mSP)	C (Inyectado)	C (Depositado)
	500	75
4,336	1,000	120
	2,000	201

En la **Figura 3.10** se muestra una vista superior de la mSP antes y después del proceso de funcionalización. El número de átomos inyectados se declaró en el archivo de entrada (LAMMPS), mientras que el número de átomos depositados se calculó con OVITO. En la **Figura 3.10a** se muestra la mSP antes de la funcionalización; en la **Figura 3.10b** se muestra la mSP con 75 átomos de C depositados; en la **Figura 3.10c** se presenta la mSP con 120 átomos depositados; por último, en la **Figura 3.10d** se observa la mSP con 201 átomos. Además, se realizó el cálculo para obtener el porcentaje de depósito con la misma velocidad, obteniendo un resultado del ~12 % por cada tipo de archivo. A medida que aumenta el número de átomos inyectados, aumenta la penetración de los átomos en la mSP, lo que permite que las aglomeraciones de átomos de C formen compuestos del tipo C-Si en las paredes de la mSP.

Tabla 6. Porcentaje de átomos de C depositado por zona de porosidad.

Átomos de C inyectados	Porcentaje de átomos de C depositado por capa		
	Inferior	Media	Superior
500	20%	39%	41%
1,000	33%	25%	42%
2,000	28%	30%	42%

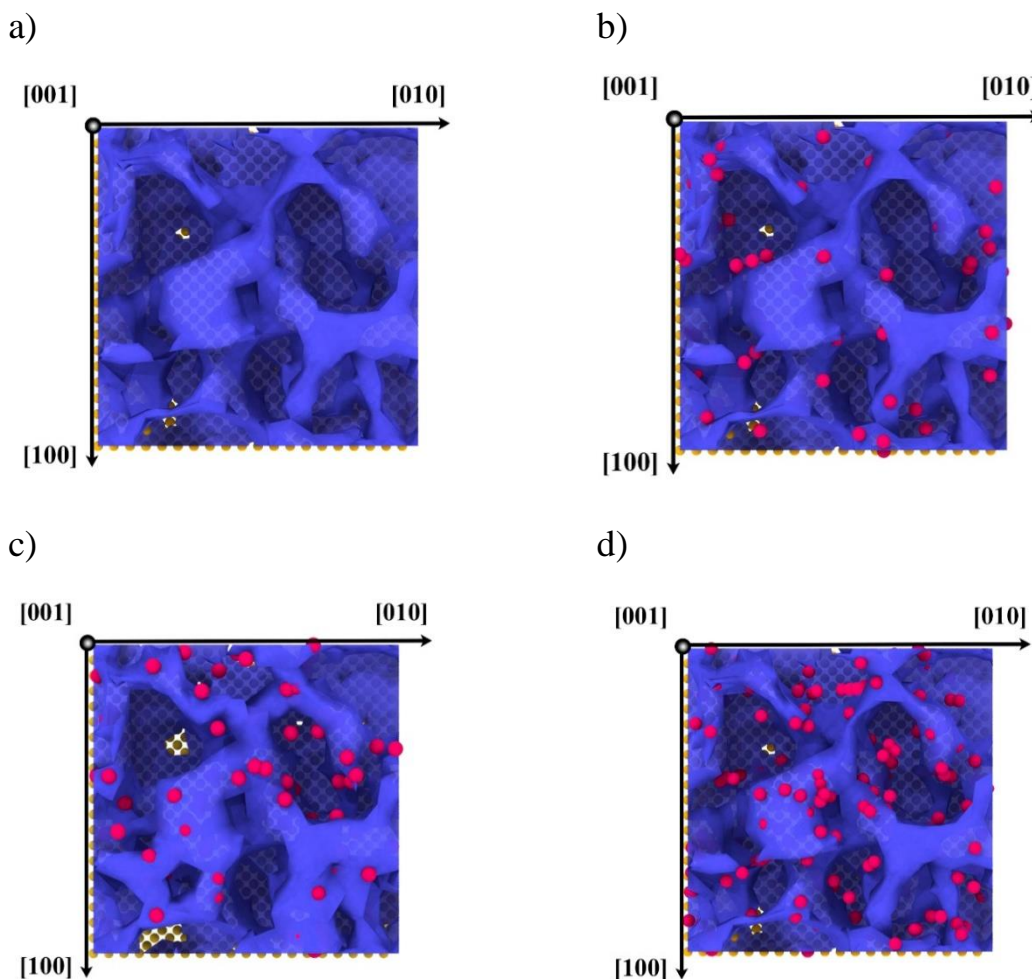


Figura 3.10. Vista superior de la mSP funcionalizado: a) mSP en cSi sin átomos de C, b) 75 átomos de C depositados, c) 120 depositados, y d) 201 depositados. Puntos magenta = átomos de C, puntos amarillos = átomos de Si y malla azul = mSP.

3.2.3 Interacciones carbono silicio

Las interacciones entre los átomos depositados con la mSP se estudiaron mediante las herramientas que tiene OVITO. La vista superior y ortogonal del archivo con 201 átomos depositados se muestra en la **Figura 3.11a**. Las líneas claras representan el posible radio de interacción entre los átomos C-C y C-Si; no es un enlace químico. La interacción C-C presentada en las paredes de la mSP verifica teóricamente que el compuesto C-Si se forma durante la inyección de átomos de C, dentro de la mSP y en sus bordes de la estructura (**Figura 3.11b** ampliada) como se observa experimentalmente [4].

La distribución de los átomos de carbono también demostró que es posible tener un número homogéneo de ellos no sólo en las capas superficiales y los límites porosos, sino también en la profundidad de cada poro, independientemente de su tamaño. Además, el radio de interacción demostró que, en estas condiciones de temperatura ambiente, primero se produce la formación de grupos de carbono como islas en la capa superficial; pero luego, durante el proceso de relajación, una gran cantidad de átomos de carbono tienen una fuerte interacción con los átomos de silicio superficiales, formando fácilmente los compositos de Si-C. Este fenómeno corresponde a la observación de resultados experimentales con condiciones térmicas similares.

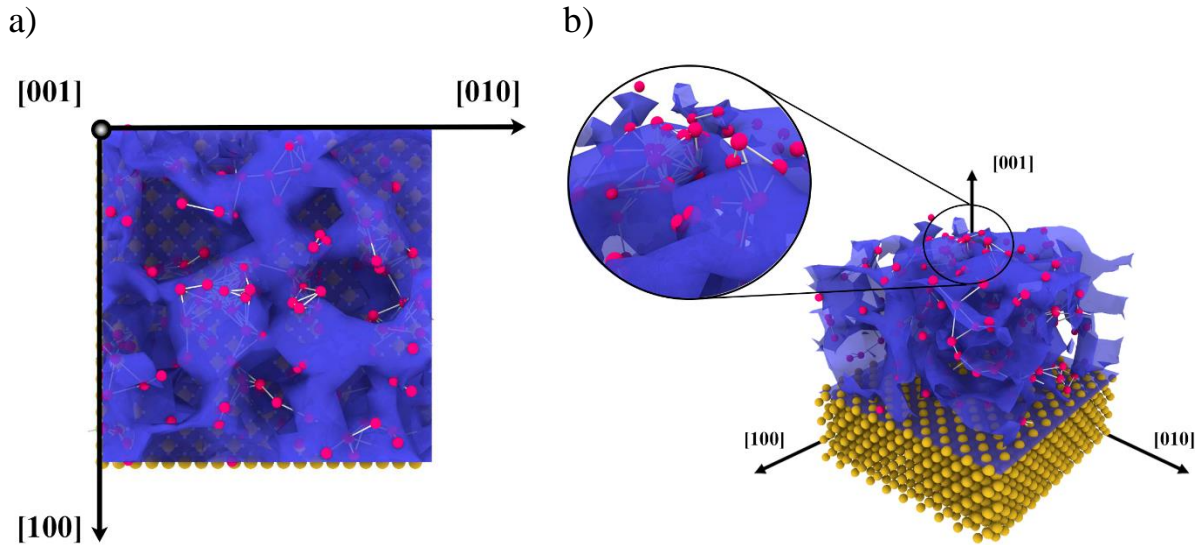


Figura 3.11. Interacciones C-C, C-Si: a) Vista superior, y b) ortogonal. Puntos amarillos = átomos de Si, puntos magenta = átomos de C, malla azul = mSP y líneas claras = posible radio de interacción [5].

3.2.4 Caracterización por difracción de rayos X por medio de DM

Una de las ventajas de utilizar el software de dinámica molecular, LAMMPS, es que podemos definir un cálculo que nos permita obtener la intensidad de difracción de rayos X. Para este proyecto de investigación se realizaron pruebas a los modelos de cSi, mSP y mSP funcionalizada con carbono.

El análisis de los difractogramas se realizó con la base de datos del programa RRUFF [6]. En la **Figura 3.12** se muestra el difractograma del silicio cristalino. En esta gráfica se puede apreciar el patrón de difracción (1 1 1) ubicado en $2\theta = 28.44^\circ$ y $2\theta = 29.95^\circ$ para el modelo creado en LAMMPS y el difractograma obtenido del RUFF, respectivamente. Estos patrones de difracción se tomaron como referencia y se obtuvo los grados de desplazamiento, el cual es de 1.51° a la derecha. Con este valor de desplazamiento se filtraron los demás datos, obteniendo

una tendencia a este desplazamiento con los demás patrones de difracción del modelo del silicio cristalino. La presencia de otros patrones de difracción se le atribuye a que la medición se lleva a cabo en escalas muy por debajo a las realizadas de forma computacional (ángstroms) y por lo tanto estos cálculos arrojan valores que los equipos de difracción de rayos X no logran obtener. En la tabla se muestran las posiciones de los patrones de difracción obtenidos en un rango de 20 a 90°.

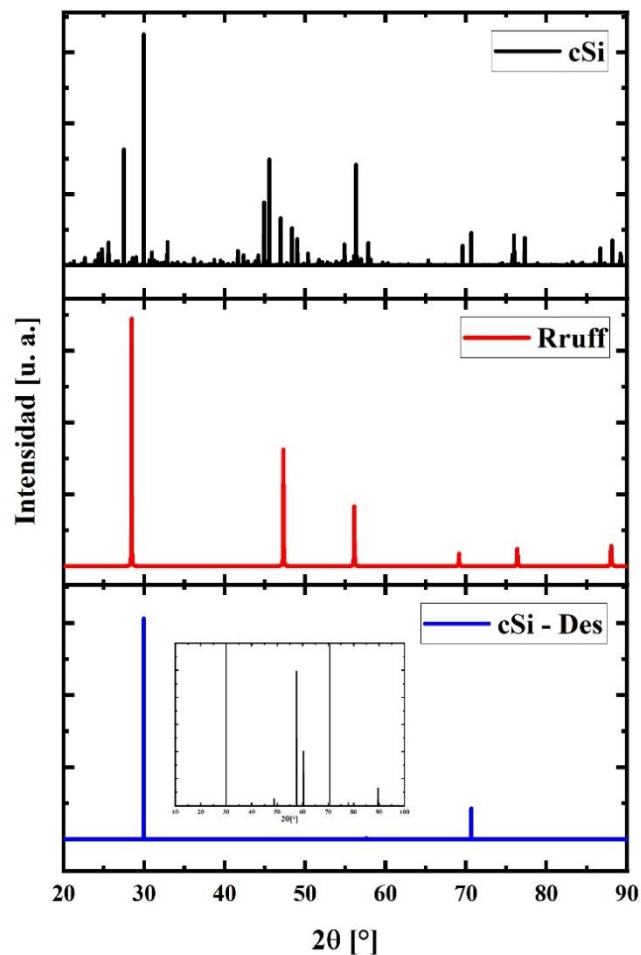


Figura 3.12. Difractograma del cSi obtenido con LAMMPS.

Tabla 7. Patrones de difracción en los difractogramas de cSi, RRUFF y cSi considerando el desplazamiento.

Plano	RRUFF	cSi - Des
(1 1 1)	28.44	29.95
(2 2 0)	47.30	48.81
(3 1 1)	56.12	57.63
(2 2 2)	58.85	60.36
(4 0 0)	69.13	70.64
(3 3 1)	76.37	77.88
(4 2 2)	88.03	89.54

En la **Figura 3.13** se muestra la comparación de los difractogramas del cSi con la mSP. En esta imagen se puede apreciar que la intensidad de los patrones de difracción aumentó; además, el desplazamiento se recorrió 1.51° a la izquierda, logrando tener las mismas posiciones que el difractograma del silicio cristalino obtenido de la base de datos del RRUFF.

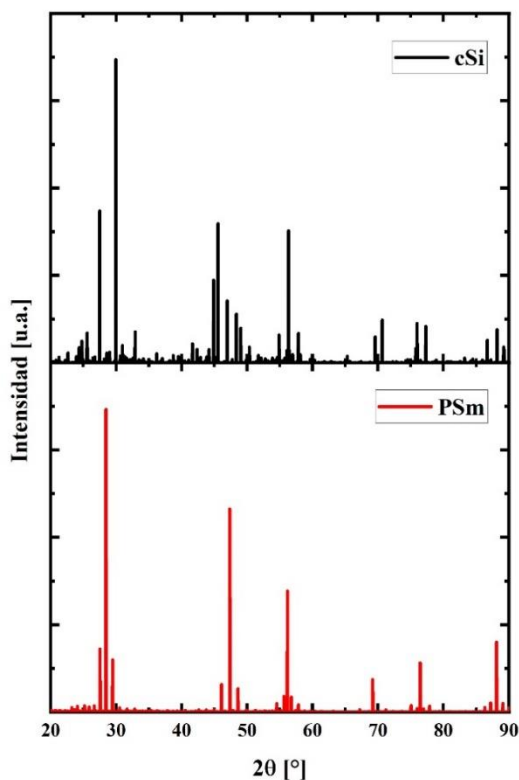


Figura 3.13. Comparación del difractograma del cSi con la mSP.

Por último, se realizó un difractograma al modelo de la mSP funcionalizado con átomos de carbono. En la **Figura 3.14** se observa que los resultados entre la mSP y la mSP con infiltración de carbono son bastante similares. Esto indica que los átomos de carbono se depositan en las paredes de la mSP y no en la superficie.

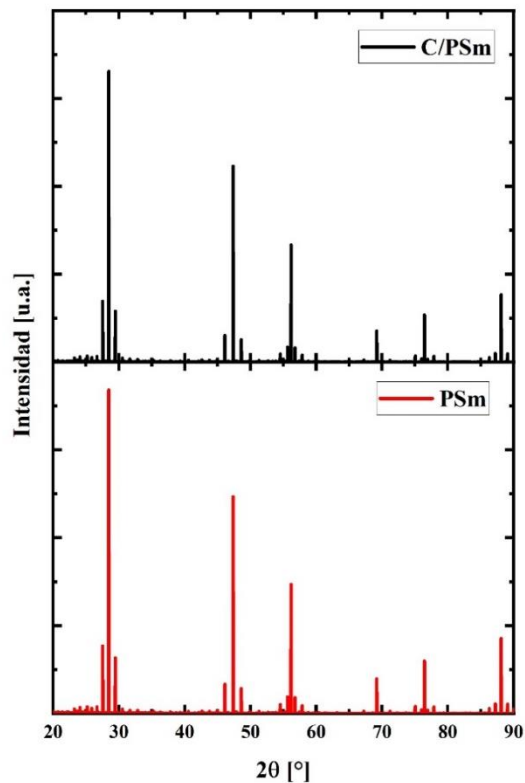


Figura 3.14. Comparación del difractograma de C/mSP y la mSP.

REFERENCIAS DEL CAPITULO 3

- [1] J. Saint *et al.*, “Towards a Fundamental Understanding of the Improved Electrochemical Performance of Silicon–Carbon Composites,” *Adv Funct Mater*, vol. 17, no. 11, pp. 1765–1774, Jul. 2007, doi: 10.1002/adfm.200600937.
- [2] Q. Pan *et al.*, “Comparing the Electrochemical Performance of Silicon/N-Rich Carbon Composite-based Anode Material Prepared by Hot-drying and Freeze-drying methods,” *Int J Electrochem Sci*, vol. 17, no. 4, p. 220446, Apr. 2022, doi: 10.20964/2022.04.01.
- [3] A. A. Fashina *et al.*, “Surface texture and optical properties of crystalline silicon substrates,” *Journal of Renewable and Sustainable Energy*, vol. 7, no. 6, Nov. 2015, doi: 10.1063/1.4937117.
- [4] F. Ramírez-González, E. Briones, J. Conde, V. M. Sánchez-Reséndiz, and H. Vilchis, “Infiltration of carbon-silicon composites into porous silicon by an electrochemical method,” *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, vol. 34, no. 7, p. 583, Mar. 2023, doi: 10.1007/s10854-023-10003-x.
- [5] A. L. Melchor, C. Camas, F. R. González, and H. Vilchis, “Molecular dynamics to model carbon infiltration into a porous silicon matrix: An experimental and computational approach,” *Comput Mater Sci*, vol. 238, p. 112949, Apr. 2024, doi: 10.1016/j.commatsci.2024.112949.
- [6] B. Lafuente, R. T. Downs, H. Yang, and N. Stone, “The power of databases: The RRUFF project.”

CAPÍTULO 4 CONCLUSIONES

Se logró obtener óxido de grafeno usando GF como precursor. Los resultados de las caracterizaciones estructurales arrojaron presencia del plano preferencial (0 0 1) ubicado en $2\theta = 9.82^\circ$ además, se tiene presencia del plano preferencial (0 0 2) ubicado en $2\theta = 42.28^\circ$. La baja intensidad de este plano nos indica una oxidación del GF, dando paso a la formación de óxido de grafeno.

En los patrones de difracción de la mSP se presenta el pico $\sim 69^\circ$ el cual hace referencia al silicio poroso; por otro lado, en la caracterización morfológica se logra apreciar que la formación de poros está parcialmente alineados al plano y a la fuente de poros. Además, se obtuvieron macroporos distribuidos aleatoriamente con un diámetro de $\sim 2 \mu\text{m}$.

En los análisis de las caracterizaciones estructurales se aprecian los picos a 28.3° , 47.3° y 56.1° , los cuales corresponden al silicio con orientaciones en los planos (1 1 1), (2 2 0) y (3 1 1), respectivamente. La presencia de estos picos se atribuye a la presencia de compuestos de carbono-silicio, esto debido a la funcionalización; además, las caracterizaciones morfológicas se logra apreciar aglomerados de silicio los cuales están cubiertos con átomos de carbono, por lo tanto, se propone la formación de un compuesto de carbono-silicio en la mSP.

Se utilizó dinámica molecular para construir un modelo de una matriz de silicio poroso (mSP) con macroporos distribuidos aleatoriamente mediante LAMMPS. El potencial de Tersoff para el sistema silicio carbono permite construir el modelo mediante las interacciones C-C, C-Si, Si-Si.



La funcionalización de la mSP con carbono da como resultado la formación de un compuesto de carbono-silicio, que consiste en átomos de carbono que cubren grupos de silicio, como se observa en el modelo donde el proceso de relajación tiene un fuerte efecto en la formación de los compuestos. El modelo concuerda con los resultados experimentales además emula la porosidad de la mSP y su funcionalización con átomos de carbono. La dinámica molecular es una herramienta útil para estudiar la funcionalización de la mSP, si está disponible el potencial para su uso en la funcionalización.

4.1 Trabajo a futuro

- Recrear los modelos utilizando un potencial de tipo “Force Field”. Este tipo de potenciales contienen la información de los elementos (silicio, carbono y oxígeno) esenciales para recrear la funcionalización de la matriz de silicio poroso con óxido de grafeno.
- Exportar la información obtenida a través de la dinámica molecular y realizar modelos utilizando la teoría del funcional de la densidad (por sus siglas en inglés, DFT) para obtener información referente a la energía de enlaces.
- Creación de modelos de silicio poroso funcionalizándolo con materiales como el óxido de zinc y óxido de galio.



ANEXOS

A. Ejemplo de código desarrollado en LAMMPS para C/MSP

```
#-----Initialize Simulation-----
Units                metal
dimension            3
boundary             p p f
atom_style           atomic
variable             a equal 5.431          #---En Angstroms---
variable             b equal $a*10
variable             c equal $a*20
variable             ax equal $a*2
variable             by equal $a*4
variable             cz equal $a*6
variable             dx equal $a*8
variable             a14 equal ${a}*14
variable             a19 equal ${a}*19

#-----Create Atoms-----
Region              one block 0 $b 0 $b 0 $c units box
create_box          2 one

region             Si block 0 $b 0 $b 0 $b units box
region             adatoms block      2.0 ${b} 2.0 ${b}  ${a14} ${a19} units box

region             estatico block      INF INF  INF INF  INF ${b} units box
region             bt      block      INF INF  INF INF  ${by} ${cz} units box
region             superf block  INF INF  INF INF  ${cz} ${b} units box

lattice            diamond $a &
                  orient x 1 0 0 orient y 0 1 0 orient z 0 0 1
create_atoms       1 region Si

group              gestatic    region estatico
group              gbt         region bt
group              gfree      subtract all gbt gestatic
group              mobile     union gbt gfree

region             tp3 block INF INF  INF INF  ${dx} ${b} units box
group              tp3 region tp3
delete_atoms       random fraction 0.8 yes all tp3 482793

region             tp2 block INF INF  INF INF  ${cz} ${dx} units box
group              tp2 region tp2
delete_atoms       random fraction 0.75 yes all tp2 482793

region             tp1 block INF INF  INF INF  ${by} ${cz} units box
group              tp1 region tp1
delete_atoms       random fraction 0.7 yes all tp1 482793

#-----Define Atoms-----
mass              1      28.08      #Silicio
```



ANEXOS



```
mass          2      12.011      #Carbono

group         Si type 1
group         C  type 2

#-----Interatomic Potential-----
pair_style    tersoff
pair_coeff    * * 2005_SiC_I.tersoff Si C
neighbor      2.0 bin
neigh_modify delay 1 check yes

dump          dump1 all custom 100 SiC_3C_S_P1.dump id type x y z
thermo 10
thermo_style  custom step pe lx ly lz
min_style     cg

compute 1     all xrd 1.541838 Si 0 2Theta 20 90 c 1 1 1 LP 1
fix          1     all ave/histo/weight 1 1 80000 20 90 3500 c_1[1] c_1[2] mode
vector file  MSP_3C_P1.txt

#-----Distribution of atoms-----
fix          2     gestatic setforce 0.0 0.0 0.0

min_style     cg
minimize      1e-8 1e-8 1000 1000
timestep      0.001

fix          3     gbt nvt temp 300 300 10 drag 0.0
fix          4     gfree nve
fix          5     gfree deposit 2000 2 10 95485 region adatomos near 1.2 vz -6.44
-6.44 units box

thermo_modify lost ignore flush yes

run          80000

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

B. Resumen de producción y participación académica

Artículo indexado

Melchor, A. L., Camas, C., González, F. R., & Vilchis, H. “Molecular dynamics to model carbon infiltration into a porous silicon matrix: An experimental and computational approach”, *Computational Materials Science*, Vol. 238, 112949, 2024, DOI: <https://doi.org/10.1016/j.commatsci.2024.112949>.

Solís-Cisneros, H. I., Vilchis, H., Hernández-Trejo, R., Melchor-Tovilla, A. L., Guillén-Cervantes, Á., & Gutiérrez, C. A. H. "Study and characterization of the nanotextured Ga₂O₃-GaOOH formations synthesized via thermal oxidation of GaAs in ambient air." *Semiconductor Science and Technology*, Vol. 38, No 10, 105004, 2023. DOI: 10.1088/1361-6641/acf2be

Congresos, seminarios, talleres, cursos

Participación en el curso “Mendeleev Training Certification of Achievement” impartido por el Dr. Francisco Sebastián Ramírez González.

Virtual, 28 de enero de 2022

Participación en la “Semana de Divulgación de la Ciencia: Energías Renovables” en la modalidad póster con el tema “Síntesis y caracterización de óxido de grafeno usando el método de Hummers y silicio poroso mediante ataque electroquímico”.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, Agosto – Septiembre 2022

Participación en el curso “Cristalografía y difracción de policristales” impartido por el Dr. Lauro Bucio Galindo, duración de 40 h, dentro de la segunda edición de la Escuela Virtual de Caracterización de Materiales 2022 organizada por la Sociedad Mexicana de Materiales

Virtual, Septiembre 2022



Participación como ponente con el tema “Hablemos de semiconductores”, en el “Congreso Estatal de Ciencia de los Materiales Chiapas 2023”.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, 24 de abril de 2023

Participación en el curso virtual “Los derechos y la importancia de los criterios ESG”, duración de 8 h, auspiciado por becas Santander e impartido por ANUIES

Virtual, Abril 2023

Participación en las Jornadas Nacionales de Física con la actividad "Pabellón de experimentos científicos"

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, 21 de junio de 2022.

Participación en el curso “Estrategias para fomentar el aprendizaje en niños”, duración de 5 h, auspiciado por el Instituto de Investigación y Gestión en Riesgos de Cambio Climático

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, 5 de agosto de 2022

Participación en el diplomado “Diplomado en Semiconductores”, duración de 120 h, auspiciado por el Tecnológico Nacional de México.

Virtual, Mayo – Agosto 2023

Participación en el 31st International Materials Research Congress (IMRC 2023), modalidad presentación oral presencial con el trabajo “study of carbon infiltration in porous silicon matrix by modeling of the electrochemical process”.

Cancún, Quintana Roo, Agosto 2023

Participación en el 1er Congreso De Ciencias Y Desarrollo Tecnológico y 2nd. International Material & Systems Congress for Renewable Energy Applications,



modalidad poster con el trabajo “Estudio de la infiltración de carbono en una matriz de silicio poroso mediante dinámica molecular”.

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, Septiembre 2023

Nombramientos

Presidenta del Capitulo Estudiantil de la Universidad de Ciencias y Artes de Chiapas de la Sociedad Mexicana de Materiales, A.C.

Enero – Diciembre 2023

Estancias

Instituto de Ciencias de la Benemérita Universidad Autónoma de Puebla (ICUAP), Posgrado en Dispositivos Semiconductores (PSD); Conocimiento práctico - experimental en el depósito de diferentes materiales a través de los métodos de MOCVD y HFCVD, como parte del desarrollo del proyecto de investigación relacionado al estudio de la heteroestructura del OG/MSP. Supervisor: Dr. Godofredo García Salgado.

Heroica Puebla de Zaragoza, Puebla; abril - mayo de 2023