

El Método de la Matriz Estocástica y su implementación en la modelación de películas delgadas nanoestructuradas de dióxido de cerio depositadas por CVD.

Juan Peña*[±]&, Mario F. García-Sánchez[±], Guillermo Santana[±], B. Marel Monroy Peláez[±], S. Rojas[&].

*Instituto de Ciencias Nucleares, [±]Instituto de Investigaciones en Materiales, &Facultad de Ciencias, Universidad Nacional Autónoma de México, Ciudad Universitaria, Coyoacán 04510, México D.F., México .

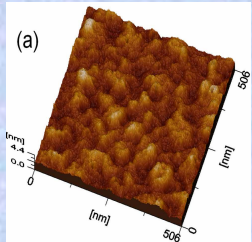
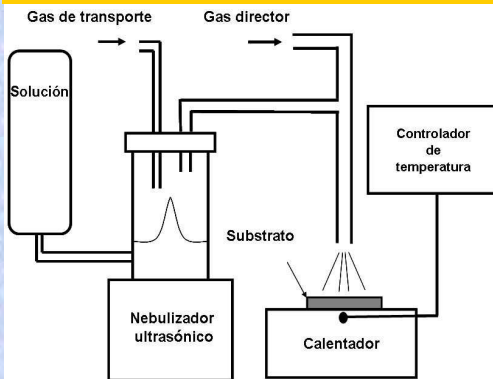
Resumen

La búsqueda de nuevas fuentes de energía no contaminantes es una de las tareas que se enfrenta actualmente. Las SOFC aparecen como una de las alternativas en este sentido, con el inconveniente de altas temperaturas de operación. En este trabajo se prepararon películas delgadas nanoestructuradas de CeO₂ sobre sustratos de silicio por CVD. El utilizar películas delgadas disminuye el valor de la resistencia y el hecho de que sean nanoestructuradas permite una mejora de las propiedades eléctricas. La segunda parte de nuestro trabajo consiste en describir cómo crecen los sólidos y representar este proceso a través de un modelo que tome en cuenta la fenomenología que tiene lugar cuando los átomos o moléculas se aglomeran para formar un sólido y para ello utilizaremos el MM Estocástica.

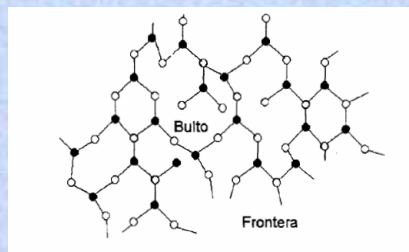
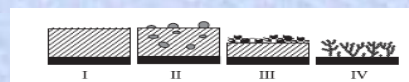
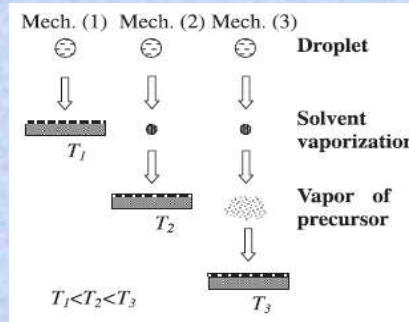
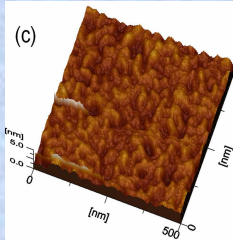
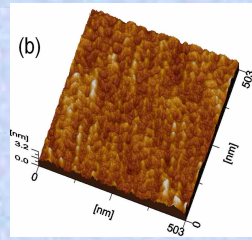
Objetivo

Utilizar el Modelo de la Matriz Estocástica para modelar el crecimiento de películas delgadas de CeO₂ por rocío pirolítico ultrasónico

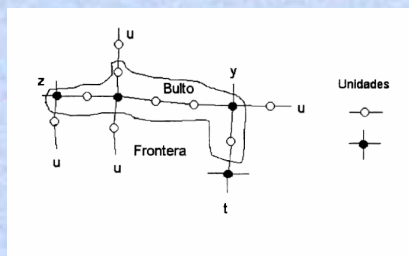
Dispositivo experimental



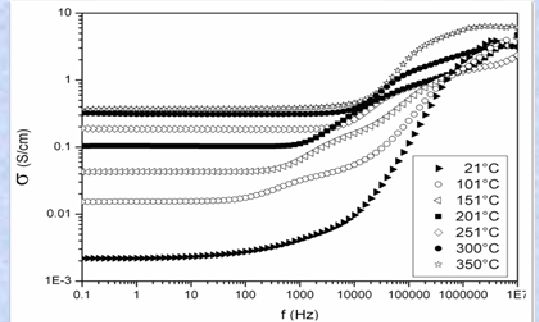
Precursor: Ce(C₅H₇O₂)₄
 Solvente: Metanol anhidro
 Aditivo: Ácido acético
 Temp. del sustrato: 325-600°C
 Flujo director: 1.0-3.5 L/min
 Tiempo de depósito: 5-30 min
 Tratamiento térmico: 600°C por 2 horas



$$Pu + Py + Pz + Pt = 1$$



$u + a \Rightarrow u$	$P(u, u) \sim 2c_a e^{-\frac{E_a}{k_s(T-T_0)}}$
$u + c \Rightarrow t$	$P(u, t) \sim 4c_c e^{-\frac{E_c}{k_s(T-T_0)}}$
$y + a \Rightarrow u$	$P(y, u) \sim c_y e^{-\frac{E_a}{k_s(T-T_0)}}$
$y + c \Rightarrow t$	$P(y, t) \sim 4c_c e^{-\frac{E_c}{k_s(T-T_0)}}$
$z + a \Rightarrow u + y$	$P(z, u) = P(z, y) \sim 2c_a e^{-\frac{E_a}{k_s(T-T_0)}}$
$z + c \Rightarrow t + y$	$P(z, t) = P(z, y) \sim 4c_c e^{-\frac{E_c}{k_s(T-T_0)}}$
$t + a \Rightarrow u + z$	$P(t, u) = P(t, z) \sim 2c_a e^{-\frac{E_a}{k_s(T-T_0)}}$
$t + c \Rightarrow t + z$	$P(t, t) = P(t, z) \sim 4c_c e^{-\frac{E_c}{k_s(T-T_0)}}$



Resultados

En este trabajo reportamos los resultados experimentales obtenidos en el crecimiento de películas delgadas nanoestructuradas de dióxido de cerio sobre sustratos de silicio por rocío pirolítico ultrasónico. Como precursor metal-orgánico se utilizó acetilacetato de cerio disuelto en metanol-anhidro, agregando ácido acético como aditivo

Conclusiones

Se demostró que el uso de aditivos es muy importante para obtener películas sin fracturas. Se optimizó tanto la temperatura del sustrato como la tasa de flujo para obtener películas nano cristalinas suaves (Ra ~ 0.4 nm), homogéneas y densas (n ~ 2), con tamaño de grano de menos de 10 nm. Se estudió la influencia del recocido térmico sobre las propiedades estructurales de las películas. Las películas obtenidas pueden ser modeladas utilizando el método de MME y presentamos un avance de este proyecto.

Bibliografía

- M.F. García-Sánchez, J. Peña, A. Ortiz, G. Santana, J. Fandiño, M. Bizarro, F. Cruz-Gandarilla, J.C. Alonso J. Am. Ceram. Soc., 93 [1] 155-160 (2010)
- R. Paredes, G.G. Naumis, R.A. Barrio Journal of Non-Crystalline Solids 329 (2003) 48-52
- M.F. García-Sánchez, J. Peña, A. Ortiz, G. Santana, J. Fandiño, M. Bizarro, F. Cruz-Gandarilla, J.C. Alonso, Solid State Ionics 179 (2008) 243-249
- R.A. Barrio, Journal of Non-Crystalline Solids 338-340 (2004) 218-221

El Método de la matriz estocástica

El método de la matriz estocástica nos provee de un algoritmo con el cual podemos describir el proceso de crecimiento para vidrios fuertes, esto es llevado a cabo calculando la probabilidad de insertar unidades en el sistema amorfo en crecimiento