

ESTUDIO DE LAS FRONTERAS DE GRANOS EN PELÍCULAS DE DIAMANTES POLICRISTALINOS CON HIDROGENO Y NITRÓGENO PARA ELECTRODOS DE BATERÍAS DE IONES DE LITIO

NOMBRE DE LOS INVESTIGADORES PARTICIPANTES

- Julio Saldaña julio.saldana1@utp.ac.pa Investigador principal
- PhD. Elida de Obaldía elida.deobaldia@utp.ac.pa Investigadora tutora

TIEMPO TOTAL DE EJECUCIÓN DE LA PROPUESTA

13 meses, junio 2022 hasta julio 2023

MONTO TOTAL DEL PROYECTO

B/. 20 000

El desarrollo de la investigación corresponde al trabajo final del programa de maestría de la Universidad Tecnológica de Panamá para obtener el grado de Maestría en Ciencias Físicas

CONTENIDO

RESUMEN EJECUTIVO	2
ANTECEDENTES DE LA PROPUESTA.....	3
JUSTIFICACIÓN DE LA PROPUESTA.....	3
OBJETIVO GENERAL.....	4
OBJETIVOS ESPECÍFICOS.....	4
METODOLOGÍA.....	5
BENEFICIOS Y PRINCIPALES BENEFICIARIOS.....	6
PERTINENCIA DE LA PROPUESTA EN EL ÁMBITO NACIONAL Y/O INTERNACIONAL	7
PRODUCTOS O RESULTADOS A ALCANZAR.....	7
COLABORADORES DE LA PROPUESTA	8
ESTRATEGIA DE DIVULGACIÓN DE LOS RESULTADOS DEL PROYECTO	9
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS ACTUALIZADAS	9
ANEXOS.....	11
CRONOGRAMA DE ACTIVIDADES PARA EL DESARROLLO DE LA PROPUESTA.....	12
PRESUPUESTO PARA EL DESARROLLO DE LA PROPUESTA.....	15
JUSTIFICACIÓN DEL PRESUPUESTO PARA EL DESARROLLO DE LA PROPUESTA.....	16
HOJA DE VIDA (NUEVO INVESTIGADOR)	Error! Bookmark not defined.
HOJA DE VIDA (INVESTIGADORA TUTORA).....	18
CONSTANCIA DEL SEMESTRE EN CURSO	Error! Bookmark not defined.
CARTA DE RESPONSABILIDAD DE LA INVESTIGADORA TUTORA	Error! Bookmark not defined.
CARTA AVAL DE LA PROPUESTA.....	Error! Bookmark not defined.
PAZ Y SALVO (NUEVO INVESTIGADOR)	Error! Bookmark not defined.
PAZ Y SALVO (INVESTIGADORA TUTORA).....	Error! Bookmark not defined.
COPIA DE CÉDULA (NUEVO INVESTIGADOR).....	Error! Bookmark not defined.
COPIA DE CÉDULA (INVESTIGADORA TUTORA).....	Error! Bookmark not defined.
ADMINISTRADOR DE FONDO: COPIA DE CÉDULA	Error! Bookmark not defined.
PACTO DE INTEGRIDAD	Error! Bookmark not defined.

RESUMEN EJECUTIVO

Hoy día el almacenamiento de energía de manera eficiente es fundamental ante la alta demanda energética para el desarrollo tecnológico; por lo tanto, se hace necesario optimizar las baterías de iones de litio mejorando las condiciones y combinaciones de los materiales en sus electrodos; de manera, que la densidad energética aumente, al igual que la vida útil de la batería.

Basado en las investigaciones de Cheng et al, (2014) se demostró que el diamante ultrananocrystalino crecido con Nitrógeno (N-UNCD) forma una capa protectora en el ánodo de grafito incrementando la vida útil baterías. Se espera que las fronteras de granos de las películas de diamantes policristalinos juegan un rol importante en la liteación del ánodo. de Obaldía et el.(2021) demostró empíricamente que las fronteras de granos de las películas policristalinas están compuestas de dos enlaces no satisfechos por cada celda única de diamante. No cabe duda de que las características de la frontera de granos en las películas de diamante policristalino juegan un papel importante en el comportamiento mejorado de los electrodos de iones de litio. El entendimiento teórico del comportamiento en las fronteras de granos es de importancia para poder determinar las mejores condiciones para desarrollar nuevos electrodos basados en películas de diamantes policristalinos. Las fronteras de granos de diamante policristalino ha sido simulados utilizando la teoría de la densidad de funciones (DFT, por sus siglas en inglés) como se demuestran en las investigaciones de Shenderova, Brenner, Omeltchenko, & Su (2000), Milas, Qi, Sheldon, & Shenoy (2011) y Cheng et al. (2014). Estos estudios están basados en entender los parámetros mecánicos como el estrés y propagación de brechas en los diamantes. Nuestro interés es determinar por medio de éste método las propiedades eléctricas y ópticas como la conductividad y la banda prohibida variando la cantidad de hidrógeno, nitrógeno y vacancias utilizando el simple modelo físico presentado por de Obaldía et al. (2021). La teoría de la densidad de funciones (DFT) ha sido utilizado con éxito por el grupo de investigación del Dr. Ching, por ejemplo, las investigaciones de Miranda et al. (2019), Ching-Prado(2018) y Fabrega et al. (2019).

En resumen, la propuesta de esta investigación es estudiar, por medio de simulaciones, las propiedades eléctricas de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos intercambiando la razón de hidrogeno, nitrógeno y vacancias en los enlaces disponible. Se tomará como referencia el modelo empírico que predice que cada celda unitaria en la superficie de los granos de diamantes posee dos sitios disponibles que pueden ser satisfechos con Hidrógenos, Nitrógenos. Se estudiará también la introducción de vacancias. Estas simulaciones se compararán con data empírica. El desarrollo de la metodología de simulación de fronteras de granos puede expandirse posteriormente a predecir la incorporación del Litio en estas fronteras de granos para determinar su eficacia en la formación de electrodos basados en películas de diamante policristalino.

ANTECEDENTES DE LA PROPUESTA

En las investigaciones de Cheng et al, (2014) se demostró que el diamante ultrananocristalino crecido con Nitrógeno (N-UNCD) forma una capa protectora en el ánodo de grafito incrementando la vida útil baterías. Se espera que las fronteras de granos de las películas de diamantes policristalinos juegan un rol importante en la liteación del ánodo.

de Obaldía et el.(2021) demostró empíricamente que las fronteras de granos de las películas policristalinas están compuestas de dos enlaces no satisfechos por cada celda única de diamante. No cabe duda de que las características de la frontera de granos en las películas de diamante policristalino juegan un papel importante en el comportamiento mejorado de los electrodos de iones de litio.

El entendimiento teórico del comportamiento en las fronteras de granos es de importancia para poder determinar las mejores condiciones para desarrollar nuevos electrodos basados en películas de diamantes policristalinos. Las fronteras de granos de diamante policristalino ha sido simulados utilizando la teoría de la densidad de funciones (DFT, por sus siglas en inglés) como se demuestran en las investigaciones de Shenderova, Brenner, Omeltchenko, & Su (2000), Milas, Qi, Sheldon, & Shenoy (2011) y Cheng et al. (2014). Estos estudios están basados en entender los parámetros mecánicos (Shen & Chen, 2007) como el estrés y propagación de brechas en los diamantes.

Nuestro interés es determinar por medio de éste método las propiedades eléctricas y ópticas como la conductividad y la banda prohibida variando la cantidad de hidrógeno, nitrógeno y vacancias utilizando el simple modelo físico presentado por de Obaldía et al. (2021).

La teoría de la densidad de funciones (DFT) ha sido utilizado con éxito por el grupo de investigación del Dr. Ching, por ejemplo, las investigaciones de Miranda et al. (2019), Ching-Prado(2018) y Fabrega et al. (2019)

JUSTIFICACIÓN DE LA PROPUESTA

En la actualidad existen esfuerzos a nivel mundial para aumentar el desarrollo de energías renovables con el objetivo de disminuir la dependencia de combustibles fósiles, en pro de la sostenibilidad ambiental, y Panamá no se encuentra exenta de ello. La Política Nacional de Ciencia y Tecnología e Innovación (PENCIYT) 2019-2024 de Panamá, ha priorizado al sector energía, agua y medio ambiente en conjunto por la relación en común que presentan con la sostenibilidad ambiental, específicamente ante el cambio climático y su impacto en Panamá; además, uno de los compromisos en los Objetivos de Desarrollo Sostenibles (ODS) es el desarrollo de energía alternativas.

Por lo tanto, el almacenamiento de energía de manera eficiente es fundamental ante la alta demanda energética para desarrollos tecnológicos; no obstante, la optimización y desarrollo de baterías se

considera relevante como solución viable ante la crisis energética que presenta la República de Panamá, al igual que muchos otros países.

Actualmente, las baterías de iones de litio son las más utilizadas para el almacenamiento de energía eléctrica, por sus grandes ventajas (elevada densidad energética, peso ligero, baja tasa de auto descarga entre otros); sin embargo, su rápida degradación, sensibilidad a las elevadas temperaturas, y otros, ha limitado la extensión de su uso a otras aplicaciones y tecnologías.

Esta propuesta de investigación busca enfocarse en la búsqueda de la optimización de las baterías de iones de litio mejorando las condiciones y combinaciones de los materiales en los electrodos; de manera que la densidad energética aumente, al igual que la vida útil de la batería. Sin embargo, para ello se debe conocer el modelo físico plausible de lo que ocurre en las fronteras de grano; estudiando por medio de simulaciones, las propiedades eléctricas de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos intercambiando la razón de hidrogeno, nitrógeno y vacancias en los enlaces disponible.

El entendimiento teórico del comportamiento en las fronteras de granos es de importancia para poder determinar las mejores condiciones para desarrollar nuevos electrodos basados en películas de diamantes policristalinos. Ante todo, es de gran relevancia considerar la Física computacional como herramienta fundamental; con su poder predictivo, permitirá comprender a través de las simulaciones, el comportamiento de la frontera de granos en películas de diamantes policristalinos (UNCD) con hidrógeno y nitrógeno para electrodos de baterías de iones de litio.

OBJETIVO GENERAL

- Determinar por simulación y experimentación el comportamiento de la frontera de granos en películas de diamantes policristalinos (UNCD) con hidrógeno y nitrógeno para electrodos de baterías de iones de litio.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS

Primera etapa (4 meses):

1. Investigar, cotizar y comprar el sistema computacional de última generación y sus respectivos accesorios
2. Acondicionar e instalar el sistema computacional en el Laboratorio Pierre Marie Curie - UTP
3. Perfeccionarse en el área de física computacional para el desarrollo de nuevos materiales.

4. Investigar, cotizar, comprar e instalar el programa informático de mecánica cuántica de materiales para simular y modelar fenómenos Físico - Químicos.
5. Desarrollar el estado del arte para las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con hidrógeno y nitrógeno
6. Elaborar la metodología para las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con hidrógeno y nitrógeno

Segunda etapa (9 meses):

7. Ensayar diferentes fronteras de granos en sistemas conocidos y verificar los resultados simulados.
8. Implementar la metodología para las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio de baterías de iones de litio.
9. Analizar los resultados de las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio
10. Desarrollar y caracterizar muestras empíricas de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio
11. Redactar el borrador para un artículo científico de la investigación realizada del estudio de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con hidrogeno y nitrógeno para electrodos de baterías de iones de litio

METODOLOGÍA

Primera etapa (4 meses):

1. Investigación de sistema computacionales de última generación funcional para la realización de simulaciones y modelaje de fenómenos físicos y químicos; y realizar las cotizaciones del sistema computacional necesario para su compra a posterior con sus respectivos accesorios: dos (2) pantallas grandes de alta resolución, mouse, teclado y batería de respaldo (UPS)
2. Preparación y acondicionamiento del área dentro del Laboratorio Pierre Marie Curie - UTP; para su posterior instalación y funcionamiento óptimo.
3. Preparación, inscripción y ejecución del curso en línea: Computational Materials Physics (Física computacional de materiales) de la Universidad de Ghent (Flemish) para obtener un certificado honorífico no oficial.

4. Investigación de programas informáticos de mecánica cuántica de materiales para la realización de simulaciones y modelaje de fenómenos Físicos y Químicos; y realizar las cotizaciones necesarias para su compra e instalación a posterior, de manera correcta y funcional
5. Búsqueda del estado del arte para las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con hidrógeno y nitrógeno
6. Desarrollo de la metodología en la implementación de simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con hidrógeno y nitrógeno

Segunda etapa (9 meses):

7. Realización de las simulaciones con diferentes fronteras de granos, para su posterior verificación con los datos de las fronteras de granos conocidos
8. Se aplica la metodología establecida para realizar las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio
9. Se elabora el análisis científico de los resultados de las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio.
10. Se desarrollo y caracteriza las muestras empíricas de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio
11. Redacción para un artículo científico de la investigación realizada del estudio de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con hidrogeno y nitrógeno para electrodos de baterías de iones de litio

BENEFICIOS Y PRINCIPALES BENEFICIARIOS

- **La Universidad Tecnológica de Panamá (UTP)**, podría verse beneficiada desarrollando nuevas líneas de investigación, lo que a su vez permite el recurso humano calificado y el desarrollo de nuevas tecnologías acompañadas de instalaciones computacionales.
- **La Universidad de Texas en Dallas (UTD)**, podría verse beneficiada con mano de obra panameña en el desarrollo de nuevos conocimientos en colaboración con la Universidad Tecnológica de Panamá como parte de la colaboración de la Dra. Elida de Obaldía con el Dr. Orlando Auciello.

Es relevante mencionar que cualquier propiedad intelectual desarrollada bajo la colaboración será propiedad de ambas universidades

PERTINENCIA DE LA PROPUESTA EN EL ÁMBITO NACIONAL Y/O INTERNACIONAL

El almacenamiento de energía de manera eficiente es fundamental ante la alta demanda energética para desarrollos tecnológicos; no obstante, la optimización y desarrollo de baterías se considera relevante como solución ante la crisis energética que presenta la República de Panamá, al igual que muchos otros países.

Por lo tanto, la Política Nacional de Ciencia y Tecnología e Innovación (PENCIYT) 2019-2024 de Panamá, ha priorizado al sector energía, agua y medio ambiente en conjunto por la relación en común que presentan con la sostenibilidad ambiental, específicamente ante el cambio climático y su impacto en Panamá.

Es importante resaltar que uno de los compromisos de los Objetivos de Desarrollo Sostenibles (ODS) es el desarrollo de energías alternativas; así mismo, esta propuesta de investigación busca enfocarse en la búsqueda de la optimización de las baterías de iones de litio mejorando las condiciones y combinaciones de los materiales en sus electrodos; de manera, que la densidad energética aumente, al igual que la vida útil de la batería. No obstante, para ello se debe conocer el modelo físico plausible de lo que ocurre en las fronteras de grano; estudiando por medio de simulaciones, las propiedades eléctricas de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos intercambiando la razón de hidrógeno, nitrógeno y vacancias en los enlaces disponible.

Además, es importante mencionar la colaboración internacional por parte del PhD. Orlando Auciello (Distinguished Endowed Chair) perteneciente al Departamento de Materials Science and Engineering en la Universidad de Texas en Dallas (UTD); lo que permitirá el fortalecimiento del recurso humano y cooperación internacional en la investigación y desarrollo de nuevos electrodos, entre ambas instituciones (UTD y UTP).

PRODUCTOS O RESULTADOS A ALCANZAR

Primera etapa (4 meses):

1. Evidencias de las cotizaciones y compra de la cotización más factible ante la adquisición de la estación de trabajo computacional de última generación y sus accesorios: dos (2) pantallas grandes de alta resolución, mouse, teclado y batería de respaldo (UPS).
2. Evidencias del sistema computacional instalado y funcionando en el Laboratorio Perrie Marie Curie - UTP

3. Certificación honorífica no oficial del cumplimiento de los temas requeridos del curso en línea: Computational Materials Physics (Física computacional de materiales) de la Universidad de Ghent de Holanda.
4. Evidencia de las cotizaciones, compra e instalación del programa informático de mecánica cuántica de materiales para simular y modelar fenómenos Físico - Químicos, instalados y funcionando correctamente en la estación de trabajo computacional de última generación.
5. Presentación del desarrollo completo del capítulo introductorio para la tesis del programa de maestría en Ciencias Físicas
6. Metodología por implementar en las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con hidrógeno y nitrógeno

Segunda etapa (9 meses):

7. Resultados comparativos de las diferentes fronteras de granos en sistemas conocidos versus los resultados simulados.
8. Resultados preliminares de la metodología implementada para las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio
9. Evidencia del análisis de resultados de las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio
10. Evidencia de los resultados de la caracterización de las muestras empíricas de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio
11. Borrador para un artículo científico de la investigación realizada del estudio de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con hidrogeno y nitrógeno para electrodos de baterías de iones de litio

COLABORADORES DE LA PROPUESTA

	Nombre	Máximo grado académico	Dedicación al proyecto (Horas semanales)
Estudiante (Nuevo Investigador)	Julio Saldaña	Maestría	30
Investigador (Tutor)	Elida de Obaldía	Doctora	5

La Dra. de Obaldía es miembro del Laboratorio Pierre Marie Curie, cuyo director es el Dr. Eleicer Ching quién tiene amplia experiencia en simulaciones de estados sólido y está dispuesto a colaborar en este proyecto. De la misma forma, debido a la colaboración internacional de la Dra. de Obaldía con el departamento de Biomedicina e Ingeniería de los materiales de la Universidad de Texas en Dallas, el Dr. Auciello y el Dr. William Vandenberghe están dispuestos a colaborar como asesores para el éxito de esta propuesta.

ESTRATEGIA DE DIVULGACIÓN DE LOS RESULTADOS DEL PROYECTO

Como estrategia de divulgación de esta propuesta de investigación se contempla realizar lo siguiente:

1. Postulación para la publicación en revista científica
2. Postulación para la presentación de los resultados en congreso nacional
3. Presentación y sustentación del trabajo final de grado (Tesis) del programa de Maestría en Ciencias Físicas de la UTP

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS ACTUALIZADAS

Cheng, Y. W., Lin, C. K., Chu, Y. C., Abouimrane, A., Chen, Z., Ren, Y., ... Auciello, O. (2014).

Electrically conductive ultrananocrystalline diamond-coated natural graphite-copper anode for new long life lithium-ion battery. *Advanced Materials*, 26(22), 3724-3729.

<https://doi.org/10.1002/adma.201400280>

Ching-Prado, E. (2018). Stress dependence of structure, electronic and optical properties of BaTiO₃ from WC, VdW-DF-C09 and HSE functional calculations. *Ferroelectrics*, 535(1), 171-182.

<https://doi.org/10.1080/00150193.2018.1474664>

de Obaldía, E. I., Alcantar-Peña, J. J., Wittel, F. P., Veyan, J. F., Gallardo-Hernandez, S.,

Koudriavtsev, Y., ... Auciello, O. (2021). Study of atomic hydrogen concentration in grain

boundaries of polycrystalline diamond thin films. *Applied Sciences (Switzerland)*, 11(9), 1-15.

<https://doi.org/10.3390/app11093990>

Fabrega, I., Bethancour, G., Miranda, H., Obaldia, E. De, Ching, E., & Abrego, I. (2019). Optical properties in anodized aluminum oxide films. *Proceedings - 2019 7th International Engineering, Sciences and Technology Conference, IESTEC 2019*, 67-71.

<https://doi.org/10.1109/IESTEC46403.2019.00021>

Milas, I., Qj, Y., Sheldon, B. W., & Shenoy, V. B. (2011). First-principles study of void induced stresses at a diamond (100) grain boundary. *Journal of Applied Physics*, 109(3).

<https://doi.org/10.1063/1.3544366>

- Miranda, H., Velumani, S., Pérez, C. A. S., Krause, J. C., D' Souza, F., De Obaldía, E., & Ching-Prado, E. (2019). Effects of changes on temperature and fluorine concentration in the structural, optical and electrical properties of SnO₂:F thin films. *Journal of Materials Science: Materials in Electronics*, 30(16), 15563-15581. <https://doi.org/10.1007/s10854-019-01933-6>
- Shen, L., & Chen, Z. (2007). An investigation of grain size and nitrogen-doping effects on the mechanical properties of ultrananocrystalline diamond films. *International Journal of Solids and Structures*, 44(10), 3379-3392. <https://doi.org/10.1016/j.ijsolstr.2006.09.028>
- Shenderova, O., Brenner, D., Omeltchenko, A., & Su, X. (2000). Atomistic modeling of the fracture of polycrystalline diamond. *Physical Review B - Condensed Matter and Materials Physics*, 61(6), 3877-3888. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.61.3877>

ANEXOS

<p>Se elabora el análisis científico de los resultados de las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio.</p>	<p>Evidencia del análisis de resultados de las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio</p>	<p>Analizar los resultados de las simulaciones de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio</p>																
<p>Se desarrollo y caracteriza las muestras empíricas de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio</p>	<p>Evidencia de los resultados de la caracterización de las muestras empíricas de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio</p>	<p>Desarrollar y caracterizar muestras empíricas de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con diferentes porcentajes de Hidrógeno y Nitrógeno, para electrodos de baterías de iones de litio</p>																
<p>Redacción para un artículo científico de la investigación realizada del estudio de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con hidrogeno y nitrógeno para electrodos de baterías de iones de litio</p>	<p>Borrador para un artículo científico de la investigación realizada del estudio de las fronteras de granos en películas de hidrogeno y nitrógeno para electrodos de baterías de iones de litio</p>	<p>Redactar el borrador para un artículo científico de la investigación realizada del estudio de las fronteras de granos en películas de diamantes policristalinos con hidrogeno y nitrógeno para electrodos de baterías de iones de litio</p>																
<p>Redactar informe técnico y financiero de la segunda etapa.</p>	<p>Entregado informe técnico y financiero de la segunda etapa a la SENACYT.</p>																	

PRESUPUESTO PARA EL DESARROLLO DE LA PROPUESTA

Presupuesto

ETAPA	OBJETO DE GASTO PERMISIBLE	MONTO POR OBJETO DE GASTO (B/.)	MONTO TOTAL DE LA FASE (B/.)
I	Estación de trabajo computacional y accesorios: <ul style="list-style-type: none"> • Workstation, software, teclado, ratón y flete • Programa informático de mecánica cuántica para materiales • 2 pantallas alta resolución • UPS (batería de respaldo) • Escritorio y silla 	B/. 12,000.00	B/. 12,840.00
	Gastos administrativos - CEMCIT (7%)	B/. 840.00	
II	Pago por servicios para uso de equipo, análisis de muestras y el espacio no disponible para el desarrollo del proyecto	B/. 4,100.00	B/. 7,160.00
	Computadora de trabajo portátil de última generación para conexión remota al sistema	B/. 2,000.00	
	Otros gastos: imprevistos	B/. 591.59	
	Gastos administrativos - CEMCIT (7%)	B/. 468.41	
			B/. 20,000.00

JUSTIFICACIÓN DEL PRESUPUESTO PARA EL DESARROLLO DE LA PROPUESTA

JUSTIFICACIÓN DEL PRESUPUESTO:

<p>I ETAPA:</p>	<p>Estación de trabajo computacional: Se considera la compra de una estación de trabajo computacional hardware software y accesorios; y la misma, debe presentar especificaciones necesarias de última generación para el rendimiento óptimo en el modelaje y simulaciones de mecánica cuántica de los materiales; además de sus accesorios como: teclado, ratón, 2 pantallas grandes de alta resolución, UPS (batería de respaldo) y programas informáticos de mecánica cuántica para materiales.</p> <p>A continuación, se detalla los precios aproximados que podría tener esos productos:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Estación de trabajo computacional hardware, software, teclado, ratón y flete (\$10,000) • Programa informático de mecánica cuántica para materiales (\$1,000) • 2 pantallas alta resolución (\$560) • UPS (batería de respaldo) (\$240) • Escritorio y silla (\$200) <p>Este equipo de trabajo es fundamental para realizar las simulaciones necesarias y cumplir el objetivo general de esta propuesta de investigación y su compra deberá incluir los impuestos de importación y flete; ya que la misma, se consigue a través de compras en línea (Estados Unidos adjunto presupuesto aproximados del Workstation). Además, se considera un escritorio y silla para la estación de trabajo computacional.</p> <p>Justificación de acuerdo con el numeral 1 contemplado en la Artículo 49 del Reglamento de Contrataciones por Mérito de la SENACYT (Resolución Administrativa No.191 de 31 de julio de 2017)</p>
	<p>Concerniente a los pagos administrativos a la CEMCIT que cobrará el 7% del total del presupuesto adjudicado por el manejo administrativo de fondo.</p> <p>Justificación de acuerdo con el numeral 20 contemplado en la Artículo 49 del Reglamento de Contrataciones por Mérito de la SENACYT (Resolución Administrativa No.191 de 31 de julio de 2017)</p>

Computadora de trabajo portátil de última generación para la conexión al sistema computacional (estación de trabajo) para realizar los ensayos necesarios de manera remota.

Esta computadora de trabajo móvil será necesario al momento de realizar la recolección de datos en el laboratorio de la Universidad de Texas en Dallas (Estados Unidos). La misma, permitirá realizar los análisis de los resultados necesario de manera paralela al workstation (simulaciones del programa de mecánica cuántica de materiales).

Igualmente, este equipo permitirá realizar el análisis de la búsqueda del estado del arte y desarrollo del trabajo de final de la maestría en Ciencias Físicas; incluyendo la redacción a la propuesta de publicación en revista científica.

Justificación de acuerdo con el numeral 1 contemplado en la Artículo 49 del Reglamento de Contrataciones por Mérito de la SENACYT (Resolución Administrativa No.191 de 31 de julio de 2017)

II ETAPA:

ThinkPad P17 Gen 2 Intel (17") - Mobile Workstation

Part Number 20YU002LUS

\$1,889.00

Savings: \$1,670.00 (46%)



Ships in 4+ months

− 1 +

Hide Specs ^

eCoupon Applied: WSDOORBUSTERS

eCoupon Limit to 2 units only

Save for Later | Remove

System Specs (Edit)

- Processor: 11th Generation Intel® Core™ i7-11800H Processor (2.30 GHz, up to 4.60 GHz with Turbo Boost, 8 Cores, 16 Threads, 24 MB Cache)
- Operating System: Windows 10 Pro 64
- Graphics: NVIDIA® RTX™ A2000 4GB
- Memory: 16 GB DDR4 3200MHz (2 x 8 GB)
- Storage: 512 GB PCIe SSD Gen 4
- Display: 17.3" FHD (1920 x 1080) IPS, anti-glare, 300 nits
- Camera: IR & 720p HD
- Fingerprint Reader: Fingerprint Reader
- Keyboard: Backlit - US English with Number Pad
- WLAN: Intel® Wi-Fi 6E AX210 802.11AX (2 x 2) & Bluetooth® 5.2
- Warranty: 1 Year Depot or Carry-in

<https://www.lenovo.com/us/en/cart.html>

<p>Se considera el pago por servicios para uso de equipo, análisis de muestra y espacio no disponible para el desarrollo del proyecto en la Universidad Tecnológica de Panamá; sin embargo, estos se encuentran disponibles en el laboratorio de la Universidad de Texas en Dallas.</p> <p>Justificación de acuerdo con el numeral 2 contemplado en la Artículo 49 del Reglamento de Contrataciones por Mérito de la SENACYT (Resolución Administrativa No.191 de 31 de julio de 2017)</p>
<p>Concerniente a los pagos administrativos a la CEMCIT que cobrará el 7% del total del presupuesto adjudicado por el manejo administrativo de fondo.</p> <p>Justificación de acuerdo con el numeral 20 contemplado en la Artículo 49 del Reglamento de Contrataciones por Mérito de la SENACYT (Resolución Administrativa No.191 de 31 de julio de 2017)</p>
<p>El rubro de otros gastos corresponde a gastos imprevistos de divulgación, equipos o cualquier gasto aprobado que se requiera para el desarrollo satisfactorio de la investigación.</p>

**Es relevante mencionar que todos estos precios son valores aproximados y que están sujetos a cambios a medida que transcurra el tiempo*