Reporte de Resultados
27 de enero de 2017
Dr. Luis Fernando Magaña Solís
IFUNAM

Líneas de investigación

1. Cálculo de propiedades ópticas de materiales fotorrefractivos, de propiedades de transporte en soluciones electrolíticas y de sistemas nanoestructurados..

2. Adsorción de hidrógeno en superficies y conglomerados moleculares.

3. Propiedades electrónicas, catalíticas, de adsorción y ópticas de sólidos, de superficies y de conglomerados moleculares.

4. Adsorción de moléculas contaminantes en superficies de grafeno.

5. Adsorción de moléculas y átomos en cúmulos moleculares y superficies de grafeno.

Los cálculos son realizados con la Teoría de la Funcional de la Densidad, la Teoría de pseudopotenciales y Dinámica Molecular, con el código abierto QUANTUM ESPRESSO. Utilizamos el 95% de los recursos solicitados al 27 de enero de 2017.

Proyecto

Propiedades electrónicas, catalíticas, de adsorción, ópticas de sólidos, superficies y conglomerados moleculares. PAPIIT. Responsable: Dr. Luis Fernando Magaña Solís, Tipo: Investigación, Status: Inicio, Fecha de inicio: January 2017, Fecha de conclusión: Diciembre 2019.

Colaboradores

Mónica Canales y Eric García, estudiantes de doctorado, Osiris Salas, posdoctorante, Alí Jiménez, Nadxieli Delgado y Alma Marcos, estudiantes de maestría.

Artículos publicados

114.-* M. Canales, J.M. Ramírez-de-Arellano, L.F. Magana. “Interaction of a Ti-doped semi-fullerene (TiC30) with molecules of CO and CO2 “. Journal of Molecular Modeling 22(9)p. 223. September 2016.

115.-* O. Salas, E. Garcés, F. L. Castillo, and L. F. Magaña. “Absorption and reflectivity of the lithium niobate surface masked with a graphene”. AIP Advances 7, 015305 (2017); doi: 10.1063/1.4974745.

Trabajos presentados en congresos

Trabajos presentados en congresos

1. A. Jiménez, L. F. Magaña, Interacción de una alanina con una superficie de grafeno. LIX Congreso Nacional de Física. México. Congreso Nacional, Octubre 2016.

2. G. J. Vázquez, L. F. Magaña, Acerca de la superconductividad de grafeno con una cobertura grande de átomos de titanio. LIX Congreso Nacional de Física. México. Congreso Nacional, Octubre 2016.

3. G. J. Vázquez, L. F. Magaña, Calculation of the superconducting transition temperature of a graphene layer doped with niobium. MRS-2016.México, Congreso, Internacional, Agosto 2016.

4. G. J. Vázquez, L. F. Magaña, Calculation of the superconducting transition temperature of a graphene layer doped with titanium and palladium. APS March Meeting 2016. Estados Unidos de América, Congreso Internacional, March 2016.

5. J.M. Ramírez de Arellano, L. F. Magaña, Interaction of CO with an hBN surface doped with Ti and Pt: A First Principles Study. VIII Congreso Internacional de Ingeniería Física. México, Congreso Internacional, Octubre 2016.

6. M. Canales, L.F. Magaña, Adsorpton of a methane molecule on a graphene surface decorated with MC30, with M = tanium or lithium. 27th Internatonal Conference on Diamond and Carbon Materials 2016. Francia, Congreso Internacional, Septiembre 2016.

7. N. Delgado, L. F. Magaña. Estudio de las energías de adsorción para el contaminantes HClO4 con semifulerenos en sus diferentes bases. LIX Congreso Nacional de Física. México, Tipo: Congreso Nacional, Octubre 2016.

8. O. Salas, E. Garcés, F. castillo, L. F. Magaña, Changes in the reflectivity of a lithium niobate crystal decorated with a graphene layer. VIII Congreso Internacional de Ingeniería Física, Mérida, Yuc. Méx. Octubre 2016. México, Congreso Internacional, Octubre 2016.

Hemos estado trabajando con el apoyo de supercómputo-UNAM en los últimos años, durante los cuales hemos publicado **26 trabajos: 14** artículos en revistas indizadas de circulación internacional y 12 memorias arbitradas de congresos internacionales utilizando en ellos **Supercómputo UNAM**.

También han resultado **3** Tesis **Doctorales**, **3** de **maestría** y **2** de **licenciatura** de nuestras investigaciones con supercómputo.

Tesis en Proceso:

Además, con estas investigaciones se están realizando actualmente **cinco** tesis de posgrado: **dos** tesis de doctorado y **tres** de maestría.

Lista de Tesis en Proceso: 5: 3 de maestría y 2 de Doctorado.

1. **Super C** Eric Garcés. “Propiedades ópticas de un cluster de Niobato de litio interactuando con grafeno”. **Tesis Doctoral**. Ecuela Superior de Físico Matemáticas del IPN. Fecha probable de obtención del grado: junio de 2017. Director: Magaña Solís Luis Fernando.
2. **Super C** Ali Fransuani Jimenez Gonzalez . “Cálculo de las propiedades del sistema Alanina-Grafeno”.*Tesis de Maestría.* Director: Magaña Solís Luis Fernando.
3. **Super C** Nadxiieli. ”Interacción del ácido perclórico con el sistema semifulereno C30-Liti”. *Tesis de Maestría.* Director: Magaña Solís Luis Fernando.
4. **Super C** Mónica Canales. “Interacción del sistema semi-fulereno C30-metal-grafeno con moléculas contaminantes, hidrógeno y agua”. **Tesis Doctoral** Director: Magaña Solís Luis Fernando.
5. **Super C** Alma Lorena Marcos.”Adsorción de contaminantes en la superficie [0001] Ti cubierto con carbono”. Tesis de Maestría. Director: Magaña Solís Luis Fernando.

Finalmente, desde que tenemos el apoyo de supercómputo (2008), hemos presentado en Congresos **103** trabajos de supercómputo, de los cuales **83** fueron en congresos internacionales y **20** en nacionales.

Con los recursos que solicitamos seguiremos formando estudiantes al más alto nivel y publicando en revistas científicas fuertes.