Reporte de Resultados 2016

Responsable: Dr. Jorge Ramón Soto Mercado
Integrantes: Francisco E. Rojas González.
Departamento de Física, Facultad de Ciencias.

1. Título
   Cálculos basados en DFT de las propiedades catalíticas y efectos no adiabáticos de nanopartículas de metales de transición y materiales bidimensionales tipo grafeno.
   Proyecto de investigación regular, código SC16-1-IR-23
2. Resumen
   En el presente reporte de resultados se presentan los resultados obtenidos con apoyo de recursos de supercómputo que me fueron asignados para el periodo comprendido entre el 1 de marzo de 2016 y 28 de febrero de 2017.

3. Breve descripción de avances
   Durante este periodo hubo importantes avances en el proyecto que a continuación describo brevemente.
   3.1 Se encontraron las estructuras de transición y trayectorias de reacción correspondientes a la reducción de N_2O en la superficie del cúmulo catión Rh_6^+. Resultados incluidos en artículo 8.1.
   3.2 Se encontraron las estructuras de transición y trayectorias de reacción correspondientes a la reducción de N_2O en la superficie del cúmulo catión Rh_6^+. Resultados incluidos en artículo 8.1.
   3.3 Se concluyó los análisis de la posibilidad de efectos no adiabáticos en nanopartículas bimetálicas de Au-Ag susceptibles a la transición 2D-3D. Estos resultados fueron reportados en la tesis de maestría del punto 9 de este informe.
   3.4 Se analizaron los efectos no adiabáticos que llevan a la distorsión de la estructura tipo benceno Sn_6H_6 en cálculos ADF-ZORA escalar y espín-órbita. Estos resultados fueron reportados en el artículo 8.3 y presentados en la lista de congresos del punto 10 del informe.

4. Cálculos realizados (1 cuartilla)
   A continuación describo los cálculos realizados durante este periodo
   4.1 En el mes de marzo se realizaron cálculos de las estructuras de transición y trayectorias de reacción del cúmulo neutro Rh_6 en la reacción de disociación de N_2O, tomando las geometrías de octaedro y prisma y diferentes estados de multiplicidad de espín.
   4.2 En el periodo de mayo-junio se realizaron cálculos de las estructuras de transición y trayectorias de reacción del cúmulo catión Rh_6 en la reacción de disociación de $_{N2}O$, tomando las geometrías de octaedro y prisma y diferentes estados de multiplicidad de espín. Resultados incluidos en artículo 8.1.
   4.3 En el periodo de mayo-junio se realizaron cálculos de las estructuras de transición y trayectorias de reacción del cúmulo anió Rh_6 en la reacción de disociación de N_2O, tomando las geometrías de octaedro y prisma y diferentes estados de multiplicidad de espín. Resultados incluidos en artículo 8.1.

4.4 En el periodo de mayo-junio se realizaron cálculos estructuras de mínima energía de las nanopartículas bimetálicas $Ag_{11}Au_{11}$y Ag_9Au_9 y su posible rompimiento de simetría por efecto Jahn- Teller. Estos resultados fueron reportados en la tesis de maestría del punto 9 de este informe.

4.5 En el mes de junio se realizaron estudios de caminos de reacción de la nanopartícula bimetálica $Ag@Au_{12}$ reaccionando con la molécula de O_2.

4.6 En el periodo de sept-nov y el mes de enero se realizaron cálculos estructuras de mínima energía y excitaciones de la molécula tipo benceno Sn_6H_6. Estos resultados fueron reportados en el artículo 8.3 y presentados en la lista de congresos del punto 10 del informe.

4.7 En el mes de octubre se analizaron las estructuras de mínima energía de la nanopartícula FeO_4.

4.8 En el mes de diciembre se estudió la posibilidad del que la nanopartícula cúbica Rh_8 pueda disociar la molécula de N_2O.

5. Software utilizado: Amsterdam Density Functional (ADF)
6. Recursos utilizados 19092.24 hasta diciembre 2016
7. Lista de colaboraciones

   Se tiene colaboración con los investigadores B. Molina de la Facultad de Ciencias, UNAM, Jorge J. Castro del CINVESTAV-Zacatenco, Miguel Castro de la Facultad de Química, UNAM y la Dra. Virineya Bertín de la UAM-Iztapalapa.
8. Lista de artículos publicados

   8.1 "Charge and Geometrical Effect on the Catalytic N_2O Reduction by Rh_6^- and Rh_6^+ Clusters", H. Francisco, V. Bertín, Jorge R. Soto, and M. Castro, *Journal of Physical Chemistry C* **120**, 23648 (2016). **DOI**: 10.1021/acs.jpcc.6b08172

   8.2 "Strong Pseudo Jahn-Teller Effect on the Single Hexagonal Unit of Germanene", Jorge R. Soto, B. Molina, and J. J. Castro, *MRS Advances* **1**, 1591 (2016). **DOI:** 10.1557/adv.2016.14

   8.3 "Buckling on Stanene: The Role Played by Spin-Orbit Coupling and pseudo Jahn-Teller Effect", Jorge R. Soto, B. Molina, and J. J. Castro. Aceptado para su publicación en *MRS Advances*. 27/01/2016
9. Lista de alumnos graduados

   Título de la tesis: "Análisis del efecto espín-órbita y Jahn-Teller en partículas bimetálicas Au-Ag susceptibles a la transición 2D-3D y su reactividad a partir de cálculos DFT".

   Estudiante: Francisco Eduardo Rojas González

   Maestría en Nanotecnología. Universidad de Sonora

   Asesor: Dr. Jorge Ramón Soto Mercado

   Fecha de examen: 28 de junio de 2016
10. Lista de congresos nacionales e internacionales y participantes

    10.1 VI Leopoldo García-Colín Mexican Meeting on Mathematilcal and Experimental Physics. "Origin of the puckering instability in silicene and germanene 2d graphene-like nanosheets", Jorge R. Soto, El Colegio Nacional, Ciudad de México, 5-9 de septiembre de 2016.

    10.2 Nanotech 2016, "Pseudo Jahn-Teller puckering instability in graphene-like 2D crystals", J. J. Castro, J. R. Soto, and B. Molina, Puerto Vallarta, Jalisco, 14-18 de noviembre de 2016.

10.3 2016 MRS Fall Meeting, “Buckling on Stanene: The Role Played by Spin-Orbit Coupling and pseudo Jahn-Teller Effect”, Jorge R. Soto, B. Molina, and J. J. Castro. Boston, MA, USA, 28 de noviembre al 2 de diciembre de 2016.