- **Propiedades Electrónicas de Sistemas Cristalinos**

Donald H. Galván Martínez

- - Mi investigación como titular C de T. C. en el CNyN se basa grandemente en cálculos teóricos los cuales respaldan mis resultados experimentales, así como los resultados obtenidos en colaboración con otros grupos con los cuales colaboro. Es por eso es de vital importancia, por lo que respecta a mi investigación, contar con acceso a dichos recursos localizados en Super Cómputo. Mi investigación como titular C de T. C. en el CNyN se basa grandemente en cálculos teóricos los cuales respaldan mis resultados experimentales, así como los resultados obtenidos en colaboración con otros grupos con los cuales colaboro. Es por eso es de vital importancia, por lo que respecta a mi investigación, contar con acceso a dichos recursos localizados en Super Cómputo. En la actualidad se está dando soporte teórico a un grupo de investigación sobre catalizadores que se encuentra en nuestro Centro. De este modo tratamos de correlacionar las propiedades catalíticas de ciertos sistemas cristalinos con sus propiedades electrónicas. Además, se ha sometido el siguiente proyecto a la propuesta de colaboración entre el grupo de investigación del Profesor Jorge Seminario de la Universidad de Texas A&M, College Station, Texas, USA, y el suscrito. Dicho proyecto se intitula Characterization of seolites for petrochemical catalysis processes, Proposal ID Number: 2017-047. El propósito principal de este proyecto es encontrar un nuevo catalizador en el proceso de remover el azufre en petróleos pesados. Del mismo modo, se colabora con el Professor Miguel José Yacamán de la Universidad de Texas, San Antonio, en ciertos cálculos teóricos que ayuden a explicar las propiedades electrónicas/magnéticas de ciertos catalizadores. Los trabajos desarrollados son los siguientes:

i) Propiedades electrónicas de Nanotubos de Carbón con clusters de MoS_2 los cuales crecen perpendiculas y paralelos al eje del CN.

ii) Propiedades electrónicas del 1T-MoS_2 producidos por el rompimiento de CN con un gas.

Mi línea de investigación se puede intitular:

Estudio de propiedades electrónicas y magnéticas de sistemas cristalinos.

- Breve Descripción de Avances:
  a) Propiedades Electrónicas de la Eskuteruditas llenas tipo $YbFe_4P_{12}$. Tesis de Maestría de José Israel Pérez Ornelas. Avance 70%.
  b) Catalizadores bimetálicos y trimetalicos incluyendo zeolitas.
  c) Partículas de MoS_2 crecidas sobre una monocapa de Oxido de Grafeno.
  d) Partículas de MoS_2 crecidas sobe una monocapa de Grafeno y luego esa bicapa depositada sobre una monocapa de Nitruro de Boro hexagonal.
  e) Partículas de ReS_2. crecidas sobe una monocapa de Grafeno y luego esa bicapa depositada sobre una monocapa de Nitruro de Boro hexagonal.
  f) Propiedades electrónicas de NbS_2 con M = Ni, Co, Fe y Cu localizado sobre su superficie y enfrente de Nb. Un estudio experimental/teórico.
  g) Propiedades electrónicas del Grafeno, Grafeno reducido con cluster de $Mo_{(1-x)}(CoNi)_xS_2$ sobre la superficie.
  h) Propiedades electrónicas de zeolitas con diferentes clusters de Cu, Au, Ag dentro de sus cavidades.

  i) Gamma-Al2O3.
  j) Gamma-Al2O3 dopado con Ti. Para ello se consideran dos configuraciones: 1) átomos de Ti en Superficie o 2) átomos de Al en superficie.
  k) ZrO2.
  l) TiO2.
  m) SiO2.
  n) ZrO2, ZrO2 dopado con Ti. Para ello se consideran dos configuraciones: 1) átomos de Ti en Superficie o 2) átomos de Zr en superficie.
  o) Estudio de la adsorción de nano-clusters metálicos de Au, Ag, Cu y Ni en distintas superficies (MgO, Gamma-Al2O3, TiO2) y el efecto que tienen estas en el espectro de adsorción.
  p) Estudio de la interacción de Grafeno con un cluster de tipo NiWS.
  q) Estudio de las propiedades electrónicas de los catalizadores de MoS2 y del tipo NiMo y del tipo NiCoMo.
- Software utilizado para estos cálculos:
  i) Extended Huckel, Quantum Expresso, Gaussian 09.
- Lista de Colaboradores:
- Lista de Colaboradores:
  a) Dr. Sergio Fuentes, Trino Cepeda, Gabriel Alonso, J. N. Díaz de León, CNyN-UNAM.
  b) Dra. Diana Barraza Jiménez, M. A. Flores Hidalgo, Universidad Juárez en Durango.
  c) Dra. Nora Elizondo, Sergio Mejia, UANL, Monterrey, N. L.
  d) Drs. Alvaro Posada, Dr. Roberto Núñez, UNISON, Hermosillo, Sonora.

e) Professor José Miguel Yacamán, Universidad de Texas en San Antonio, Texas, USA.
f) Professor Jorge Seminario, Texas A&M University, College Station, Texas, USA.

- Lista de Artículos Publicados:

i)D. H. Galvan, J. F. Del Rosario, S. Fuentes, M. Shelyapina, "*1H-MoS_2 nanoparticles grown on a monolayer of reduced Graphene oxide and 1H-BN",* Int. J. Nanotechnol. 13(1-3)(2016) 57-69. Manuscript ID: 1201076 Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures
ii) *Experimental and Theoretical Analyses of ZnO Nanoparticles Deposited onto Single-Wall Carbon Nanotubes*
By: **Galvan**; Alonso; Tejeda; Torres; Reeja-Jayan; Ferrer; Posada-Amarillas; Barraza-Jimenez; José-Yacaman, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, 24(8) (2016) 541-546. DOI: 10.1080/1536383x.2016.1201076
Iii) R. Escamilla, E. Carbajal, M. Cruz-Irisson, M. Romeo, R. Gómez, V. Marquina, **D. H. Galvan,** A. Durán, *First-principle study of the structural, elastic, vibrational, thermodynamics and electronic properties of the Mo_2B inter metallic unde pressure,* J. Molecular Structure, 1125(2016) 350-357. DOI: 10.1016/j.molstruc.2016.07.04.
iv)J. Antúnez-García, A. Posada-Amarillas, **D. H. Galvan,** E. Smolenseva, V. Petranovski, S. Fuentes Mollado, *A DFT study of composites formed by metallic clusters M_2 (M = Ni, Cu, Fe, and Au) embedded in Faujasite $Al_2Si_{40}O_{46}$ zeolite,* Royal Society in Chemistry Advances, 6 (2016) 79160-79165, **DOI: 10.1039/C6RA13525F.**
v)J. A. Aliaga, T. A. Zepeda, B. Pawelec, J. Antúnez-García, M. H. Farías, S. Fuentes, **D. H. Galvan,**G. Alonso-Núñez, G. González. *Role of bending layers of ReS_2 microspheres on the enhancement of the DHS Activity,* J. Catalysis A: General, **en refereo**.
vi)J. O. Juárez-Sánchez, **D. H. Galvan**, A. Posada-Amarillas, *Reactivity and Stability Studies of $(CuS)_n$ (n=2-12) Clusters: A Combined DFT and NBO Approach, ,* Comput. Mater. Sci., **en refereo**
vii)D. H. Galvan, J. Antúnez-García, S. Fuentes-Moyado, *Electronic properties of $NbSe_2$ over Graphene: A meticulous theoretical analysis*, Fullerenes, Nanotubes and Carbon Nanostructures, **en refereo.**

1) Capítulos de Libros
- **D. H. Galvan,** J. F. del Rosario-Estrada, S. Fuentes, M. G. Shelyapina. *Electronic properties of 1H-MoS_2 clusters grown on Graphene Oxide.*Int. J. of Nanotechnology: Proceedings. **In Press**

3) Artículos que están en refereo
-J. Antúnez, García, **D. H. Galván, "***Analytical expression for slow Scholte wave in elastic media",* Wave Motion.
- J. A. Aliaga, T. A. Zepeda, B. Pawelec, J. Antúnez-García, M. H. Farías, S. Fuentes, **D. H. Galvan,**G. Alonso-Núñez, G. González.
Role of bended layers of ReS_2 microspheres on the enhancement of the DHS activity, ACS Catalysis, Manuscript ID: CS-2015-02496z.
-J. Estrada-Cruz, S. Fuentes Moyado, **D. H. Galván, "***Energy Bands of the 1H-MoS_2 over Reduced Graphene Oxide",* Materials Today: Proceedings. **Aceptado.**
- Combined DFT and NBO Approach to analyze Reactivity and Stability of $(CuS)_n$ (n=1-12) Clusters, Computational and Theoretical Chemistry.

- Lista de Alumnos Graduados:
  Ninguno. Hay uno en proceso.
- Lista de Congresos Nacionales e internacionales y participantes:

4) Congresos Internacionales

1-J. Antúnez-García, A. Posada-Amarillas, **D. H. Galvan,** E. Smolenseva, V. Petranovski, S. Fuentes Mollado, *A DFT study of composites formed by metallic clusters M_2 (M = Ni, Cu, Fe, and Au) embedded in Faujasite $Al_2Si_{40}O_{46}$ zeolite,*Design New Heterogeneous Catalysts: Faraday Discussion.

2-D. K. Tiwani, L. M. Morales-Villagómez, J. J. Gervacio Arciniega, J. Estudillo Ayala, **D. H. Galvan**, *Study of change in structural and magnetic behaviour with doping variation of Mn and Zn concentration in $Mn_{(x)}Zn_{(1-x)}Fe_2O_4$ nanocomposite,* XXV Int. Materials Research Congress, 14-19 agosto, 2016, Cancun, México. Platica.

3-D. H. Galvan, J. Antúnez-García, S. Fuentes-Moyado, *Electronic properties of $NbSe_2$ over graphene: A meticulous theoretical analysis*, 3rd.Meeting of the American Initiative of Metal Clusters and Nanoalloys, Octubre 26-29, 2016, UANL, Monterrey, N. L., México. **Platica Invitada.**

iv)Congresos Nacionales

1. V. J. Cedeño Garcidueñas, R. Rangel-Segura, P. Bartolo-Perez, R. García-Gutierrez, **D. H. Galvan,** J. Espino Valencia, *Impurificación de Oxido de Grafeno con diferentes precursores de Nitrógeno,* XXXVII Encuentro Nacional de la AMIDIQ, Puerto Vallarta, Jalisco, 3-6 de mayo, 2016. Memorias de Congreso. **ISBN 978-607-95593-4-2**
2. J. L. Cervantes-López, R. Rangel-Segura, J. Espino Valencia, O. E. Contreras López, H. Tiznado, **D. H. Galvan,** *Influencia de diferentes impurificantes en el crecimiento y propiedades fotoluminiscentes de nanobarras hexagonales de ZnO crecidas epitaxialmente,* XXXVII Encuentro Nacional de la AMIDIQ, Puerto Vallarta, Jalisco, 3-6 de mayo, 2016. Memorias de Congreso. **ISBN 978-607-95593-4-2**
3. J. Galindo Quezada, J. M. Quintana Melgoza, L. A. Flores Sánchez, M. G. Moreno Armenta, **D. H. Galvan**, J. M. Cornejo Bravo, *Síntesis y caracterización de magnetita Fe_3O_4*, Congreso Internacional de Investigación, Investigación Básica y Aplicada, Tijuana, B. C., ISSN 2007-9478, Vol. 5 (2016) No. 9.
4. J. Antúnez García, A. Posada-Amarillas, **D. H.Galvan,** E.Smolentseva, V. Petranovski, S. Fuentes, *Ingenieria de Estructura de Bandas en Zeolitas,* II Simposio de Nanociencias y Nanomateriales, 6-10 de junio, 2016, Ensenada, B. C., plática.
5. J. Antúnez García, A. Posada-Amarillas, **D. H.Galvan,** T. A. Zepeda, S. Fuentes Mollado, *Estudio teórico del dopamiento de disulfuro de Molibdeno con Rutenio,* II Simposio de Nanociencias y Nanomateriales, 6-10 de junio, 2016, Ensenada, B. C., plática.
6. V. J. Cedeño Garcidueñas, R. Rangel-Segura, P. Bartolo-Perez, R. García-Gutierrez, J. J. Alvarado Gil, **D. H. Galvan**, *Uso del surfactante en la decoración del Oxido de Grafeno y sus modificaciones estructurales.* VIII Congreso Nacional de Cristalografía, II Reunión de la Asociación Latino Americana de Cristalografía, 23-27 de Octubre, 2016, Mérida, Yucatán, Poster.