Reporte

Se estudiaron propiedades ópticas y electrónicas en materiales 2D como son el CdSe, BN, y superficies como Cu{311}, las cuales se doparon con moléculas orgánicas e inorgánicas.

Se realizaron cálculos de energía total de los primeros principios para investigar las propiedades estructurales y electrónicas de la adsorción de timina (T) en las superficies de nitruro de boro hexagonal bidimensional (2D-hBN) puro y dopado con Al. Se han realizado estudios que aplican la teoría funcional de densidad periódica tal como se desarrolla en el código PWscf del paquete quantum espresso. La teoría pseudopotencial se utiliza para hacer frente a las interacciones electrón-ion. La aproximación gradiente generalizada se aplica para tratar las energías de correlación de intercambio. Las interacciones de Van der Waals se incorporan en los cálculos. Considerando el T como una molécula alargada y las interacciones a través de un átomo de oxígeno del anillo de la molécula; Se exploran dos geometrías en los sistemas puro y dopado con Al: en (a) el lado O del anillo interactúa con B y en (b) el O en el extremo de la molécula interactúa con el B. El caso prístino da (4x4-a) (5x5-b) y (6x6-b), mientras que el sistema dopado muestra el (4x4-a), (5x5-a) y (6x6-a) como los estados fundamentales. Los cálculos de las energías de adsorción indican quimisorción. El dopaje mejora la reactividad superficial, lo que induce mayores energías de unión. La densidad total de estados (DOS) se calcula e interpreta con la ayuda del DOS proyectado. Debajo de la energía de Fermi, los gráficos de densidad de estados indican que los p orbitales hacen las mayores contribuciones. Por encima del nivel de Fermi, el DOS está formado principalmente por los orbitales N-s y H-s. Los gráficos de DOS indican que las estructuras tienen un comportamiento no-semiconductor.

Los productos obtenidos son:

Presentación en Congresos

- Thymine adsorption on boron nitride two dimensional structures: First principles studies. J. Castro-Medina, D. García-Toral, A. Sánchez-Castillo, M. López-Fuentes, **L. Morales de la Garza**, Gregorio H. Cocoletzi, 25th edition of the International Materials Research Congress, August 17, 2016.

- Sulfur dioxide adsorption on silicane: First principles studies. S. Torres-Morales, J. Castro-Medina, A. Sanchez-Castillo**, L. Morales de la Garza**, G H. Cocoletzi, X International Conference in Surfaces, Materials and Vacuum, September 26 -30, 2016, Mazatlán, Sinaloa, México.

- DFT vs. LEED for the determination of the surface structure: The case of the Induced Reconstruction by Oxygen of Cu{311}, **Morales de la Garza Leonardo** , Driver Stephen, King David A, X International Conference in Surfaces, Materials and Vacuum, September 26 -30, 2016, Mazatlán, Sinaloa, México.

Publicaciones:

Se terminaron los artículos de los trabajos anteriores y se enviaron a revistas internaacionales:
Mn Adsorption on the GaAs(111)–(2×2)B Surface: First Principles Studies. Jonathan Guerrero-Sanchez, J. Castro-Medina, J. F. Rivas-Silva, Noboru Takeuchi, L. Morales de la Garza, J. Varalda[3], D. H. Mosca[3], Gregorio H. Cocoletzi, Zeitschrift für Physikalische Chemie. Volume 230, Issue 5-7, Pages 943–954.

"Thymine adsorption on boron nitride two dimensional structures: First principles studies". D. García-Toral, A. Sánchez-Castillo, S. Torres-Morales, M. López-Fuentes, L. Morales de la Garza, Gregorio H. Cocoletzi. Enviado. Journal of molecular modelling

“Sulfur dioxide adsorption on silicane: First principles studies”. S. Torres-Morales, D. García-Toral, A. Sánchez-Castillo,L. Morales de la Garza, Gregorio H. Cocoletzi. Enviado.

Lista de Colaboradores:

Dr. Gregorio Hernández Cocoletzi (BUAP)
Dra. Ariadna Sánchez Castillo (UAEH)
Dra. Mirna López Fuentes (BUAP)

Alumnos graduados:

Shirley Torres-Morales
Jonathan Guerrero-Sanchez