

## PROPUESTA PARA LA CONTRATACIÓN DE PERSONAL ACADÉMICO VISITANTE

<b>FOLIO</b>	PV.A.CBI.a.001.17	<b>FECHA</b>	DÍA 23	MES 02	AÑO 2017
--------------	-------------------	--------------	-----------	-----------	-------------

CONFORME A LO PREVISTO EN EL REGLAMENTO DE INGRESO, PROMOCIÓN Y PERMANENCIA DEL PERSONAL ACADÉMICO, SE PROPONE LA CONTRATACIÓN DE PERSONAL ACADÉMICO VISITANTE, PARA OCUPAR CON CARÁCTER TEMPORAL LA SIGUIENTE PLAZA:

TIEMPO DE DEDICACIÓN COMPLETO	NO. DE HORAS (SOLO TIEMPO PARCIAL) DE CLASE:	DE OTRAS ACTIVIDADES ACADÉMICAS:
UNIDAD AZCAPOTZALCO	DIVISIÓN CIENCIAS BÁSICAS E INGENIERÍA	
DEPARTAMENTO CIENCIAS BÁSICAS	HORARIO 10:00 - 18:00 hrs	
DURACIÓN DE LA LA CONTRATACIÓN	FECHA DE INICIO DE LABORES	FECHA DE TÉRMINO DE LABORES
	DÍA 02	MES 05
	AÑO 2017	
	DÍA 01	MES 05
	AÑO 2018	

**ACTIVIDADES A REALIZAR**

DOCENCIA: IMPARTICIÓN DE LAS UEA BAJO LA RESPONSABILIDAD DEL DEPARTAMENTO DE CIENCIAS BÁSICAS, TALES COMO: INTRODUCCIÓN A LA FÍSICA, CINEMÁTICA Y DINÁMICA DE PARTÍCULAS, DINÁMICA DEL CUERPO RÍGIDO, INTRODUCCIÓN A LA ELECTROSTÁTICA Y MAGNETOSTÁTICA, TERMODINÁMICA, DINÁMICA APLICADA, FÍSICA MODERNA, CAMPOS I, CAMPOS II, ELECTROMAGNETISMO, FÍSICA DEL ESTADO SÓLIDO Y DEMÁS QUE EL DEPARTAMENTO DE CIENCIAS BÁSICAS REQUIERA. ADEMÁS APOYAR LAS UEA DEL POSGRADO EN CIENCIAS E INGENIERÍA DE MATERIALES, TALES COMO: FÍSICA DE MATERIALES, ESTADO SÓLIDO, QUÍMICA CUÁNTICA, ETC.

INVESTIGACIÓN: 1. CONSTRUCCIÓN DE LOS MODELOS DE MONOCAPAS DE GRAFENO CON UN LIGANDO ADSORBIDO. 2. ESTUDIO DE LOS PARÁMETROS DE CONVERGENCIA PARA LA SIMULACIÓN. 3. ESTUDIO DE LA ENERGÍA DE ADSORCIÓN DEL LIGANDO SOBRE LA MONOCAPA DE GRAFENO EN FUNCIÓN DEL SITIO DE ADSORCIÓN. 4. CONSTRUCCIÓN DE LOS MODELOS DE BICAPAS DE GRAFENO CON ÁNGULO RELATIVO DE 0 GRADOS CON UN LIGANDO ADSORBIDO. 5. ESTUDIO DE LA ENERGÍA DE ADSORCIÓN DEL LIGANDO SOBRE LA BICAPA DE GRAFENO CON ÁNGULO RELATIVO DE 0 GRADOS EN FUNCIÓN DEL SITIO DE ADSORCIÓN. 6. CONSTRUCCIÓN DE LOS MODELOS DE BICAPAS DE GRAFENO CON ÁNGULO RELATIVO DISTINTO DE 0 GRADOS CON UN LIGANDO ADSORBIDO. 7. ESTUDIO DE LA ENERGÍA DE ADSORCIÓN. 8. APOYAR LAS ACTIVIDADES DE INVESTIGACIÓN DEL ÁREA DE FÍSICA ATÓMICA MOLECULAR APLICADA. 9. PUBLICAR ARTÍCULOS EN REVISTAS CON ARBITRAJE ESTRICTO.

FORMACIÓN DE RECURSOS HUMANOS: SE ESTIMULARÁ EL INTERÉS DE LOS ESTUDIANTES A TRAVÉS DE SEMINARIOS Y DESARROLLO DE INVESTIGACIONES CON FINES DE PUBLICACIÓN EN EL ÁREA DE FÍSICA ATÓMICA MOLECULAR APLICADA.

**LA PLAZA HABRÁ DE SER OCUPADA POR:**

APELLIDO PATERNO Hidalgo	APELLIDO MATERNO Moreno	NOMBRE (S) Francisco Javier				CURP HIMF760720HDFDRR00
NACIONALIDAD Mexicana	R.F.C. HIMF7607206C0	FECHA DE NACIMIENTO	DÍA 20	MES 07	AÑO 1976	EDAD 40
ESTADO CIVIL SOLTERO	TELÉFONOS 5558732600	CORREO ELECTRÓNICO fhidalgo76@gmail.com				
C		No. EXT.	EDIF.	DEPTO.		

DOCUMENTOS QUE SE ANEXAN:	CURRÍCULUM VITAE <input checked="" type="checkbox"/>	R.F.C. <input checked="" type="checkbox"/>	CURP <input checked="" type="checkbox"/>
	ACTA DE NACIMIENTO O CARTA DE NATURALIZACIÓN <input checked="" type="checkbox"/>	FORMA MIGRATORIA (FM) <input type="checkbox"/>	PASAPORTE <input type="checkbox"/>
			OTROS ESPECIFIQUE <input type="checkbox"/>

**Para uso exclusivo de la Comisión Dictaminadora**

Aprobada en la Sesión No. <u>585 ORDINARIA</u>	Categoría: <u>TITULAR</u>	Nivel: <u>C</u>	Puntaje: <u>58750</u>
del Consejo Divisional de fecha	FECHA: DÍA	MES	AÑO
DÍA 30	07	MARZO	2017

PRESIDENTE DEL CONSEJO DIVISIONAL

Dra. María de Lourdes Delgado Núñez

NOMBRE Y FIRMA

PRESIDENTE DE LA COMISIÓN DICTAMINADORA

Mtra. Praxedis Lara Valencia

NOMBRE Y FIRMA

SECRETARIO DE LA COMISIÓN DICTAMINADORA

NOMBRE Y FIRMA

T1 RECTORÍA GENERAL - DIPPPA  
T2 COMISIÓN DICTAMINADORA DIVISIONAL  
T3 JEFE DE DEPARTAMENTO

T4 RECTORÍA DE UNIDAD  
T5 DIRECTOR DE DIVISIÓN  
T6 CONSEJO DIVISIONAL

Recurso 2773

DCB-162.17.  
Febrero 27 del 2017.

**DRA. MA. LOURDES DELGADO NÚÑEZ**  
Presidenta del Consejo Divisional de la  
División de Ciencias Básicas e Ingeniería  
P r e s e n t e

Por este conducto le hago llegar la propuesta de contratación como Profesor Visitante del **DR. FRANCISCO JAVIER HIDALGO MORENO**, por un año a partir del 02 de mayo del 2017.

De ser aprobada su contratación, el profesor apoyará la docencia de las UEA de Física que imparte el Departamento y contribuirá a la consolidación en la línea de investigación del Área de Física Atómica Molecular Aplicada: en particular Propiedades ópticas, electrónicas y magnéticas de sistemas de baja dimensionalidad. Se anexan la carta de postulación del Jefe del Área, el Plan de Trabajo y el *Curriculum Vitae* del Dr. Hidalgo Moreno. El recurso que se utilizará será:

< 2773 >.

Agradeciendo su atención al presente, reciba un cordial saludo.

A t e n t a m e n t e  
"Casa Abierta al Tiempo"



**FIS. LUISA GABRIELA DEL VALLE DÍAZ MUÑOZ**  
Jefa del Departamento de Ciencias Básicas



ccp. Mtra. Teresa Merchand Hernández - Secretaria Académica de la Div. de C.B.e I.

# Francisco Javier Hidalgo Moreno *Julio 20, 1976*

Febrero, 2017

---

## Resumen

*Cálculos de primeros principios, DFT, nanociencia, propiedades ópticas, actividad óptica, dicroísmo circular, nanopartículas metálicas, metales nobles, quiralidad, propiedades electrónicas, materiales bidimensionales.*

Mis líneas de investigación pueden separarse en dos vertientes, ambas basadas en cálculos de primeros principios (teoría del funcional de la densidad, DFT). La primera, iniciada durante mis estudios de posgrado bajo la dirección de la Dra. Cecilia Noguez (Premio Nacional de Ciencias 2016), está dirigida a entender el origen de la actividad óptica en compuestos organo-metálicos y en el fenómeno de dicroísmo circular electrónico en sistemas quirales, así como en sus posibles aplicaciones. La se-

gunda línea, iniciada durante mi estancia posdoctoral en el ICN2 en Barcelona bajo la dirección del Dr. Pablo Ordejón, está dirigida al estudio de propiedades electrónicas y ópticas de homoestructuras y heteroestructuras bidimensionales, tales como multicapas de dicalcogenuros de metales de transición y otros materiales semiconductores.

Paralelamente, me he dedicado a la enseñanza de las ciencias a nivel medio superior, he sido ayudante de cursos del Posgrado en Ciencias (Física) en la UNAM y profesor de discusión en la facultad de ciencias (UNAM), así como divulgador de la ciencia. Actualmente soy miembro del Sistema Nacional de Investigadores nivel I.

---

## Experiencia Profesional

IFUNAM/Departamento de Estado Sólido

### Posición posdoctoral

Investigador posdoctoral

CIUDAD DE MÉXICO, MÉXICO

Agosto 2016 – Presente

ICN2/Grupo de teoría y simulación

### Posición posdoctoral

Investigador posdoctoral visitante

BARCELONA, ESPAÑA

Agosto 2014 – Julio 2016

UNAM/Facultad de ciencias

### Profesor

Profesor discutidor en la licenciatura en Física.

CIUDAD DE MÉXICO, MÉXICO

Agosto 2013 – Julio 2014

UNAM/Instituto de Física

### Ayudante de profesor

Ayudante en cursos del posgrado en ciencias (Física)

CIUDAD DE MÉXICO, MÉXICO

Agosto 2011 – Julio 2013

### Estudiante asociado

Estudiante asociado de doctorado en ciencias (Física)

Agosto 2009 – Febrero 2014

### Estudiante asociado

Estudiante asociado de maestría en ciencias (Física)

Agosto 2005 – Marzo 2009

DGETI-SEP/CETis 8

### Profesor de Asignatura

Profesor nivel bachillerato en el Centro de Estudios Tecnológicos industrial y de servicios No. 8

CIUDAD DE MÉXICO, MÉXICO

Agosto 2005 – Julio 2011

### Profesor 3/4 de tiempo

Profesor nivel bachillerato en el Centro de Estudios Tecnológicos industrial y de servicios No. 8

Agosto 1997 – Julio 2005

### Profesor de Asignatura

Profesor nivel bachillerato en el Centro de Estudios Tecnológicos industrial y de servicios No. 8

Agosto 1994 – Julio 1997

---

## Educación

Universidad Nacional Autónoma de México, UNAM

### Doctorado en Ciencias (Física)

Tesis: Morfología y actividad óptica en nanopartículas metálicas protegidas con ligandos. Un estudio de primeros principios.

CIUDAD DE MÉXICO, MÉXICO

2009 – 2014

## Número de citas (extraído de scholar Google) y parámetros de impacto

Título	Revista	Parámetro de impacto	Número de citas
How to control optical activity in organic-silver hybrid nanoparticles (2016);	Nanoscale	7.394	0
Nanotexturing to enhance photoluminescent response of atomically thin Indium Selenide with highly tunable band gap (2016);	Nano Letters	13.592	6
Ab initio electronic circular dichroism of fullerenes, single-walled carbon nanotubes and ligand-protected metal nanoparticles (2014);	Chirality	1.886	5
Metallic influence on the atomic structure and optical activity of ligand-protected nanoparticles: a comparison between Ag and Au (2014);	Nanoscale	7.394	8
Optical activity of achiral ligand SCH <sub>3</sub> adsorbed on achiral Ag <sub>55</sub> Clusters: relationship between adsorption site and circular dichroism (2013);	ACS Nano	12.881	13
Role of morphology in the enhanced optical activity of ligand-protected metal nanoparticles; (2011, Se otorgó portada de la revista)	J. Phys. Chem. Lett.	7.458	29
Optically active nanoparticles: fullerenes, carbon nanotubes and metal nanoparticles (2010);	Physica Status Solidi (b)	1.605	13
First-principles calculations of circular dichroism of ligand-protected gold nanoparticles (2009);	Eur. Phys. J. D	1.228	14
Efficient first-principles method for calculating the circular dichroism of nanostructures (2009);	Phys. Rev. B	3.664	20
Intrinsic chirality in bare gold nanoclusters: The Au <sub>34</sub> <sup>-</sup> case (2008);	J. Phys. Chem. C	4.772	40
<b>Total de citas</b>			148
<b>Índice h</b>			7
<b>Índice i10</b>			6

## Congresos y seminarios

Taller de Transferencia de Calor a la nanoescala (Invitación)	INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM; MÉXICO 2016
Propiedades electrónicas y ópticas de materiales bidimensionales Francisco Hidalgo	Charla Invitada
Seminario Sotero Prieto (Invitación)	INSTITUTO DE FÍSICA, UNAM; MÉXICO 2016
Propiedades electrónicas y ópticas de materiales bidimensionales Francisco Hidalgo, Miguel Pruneda y Pablo Ordejón	Charla Invitada
XXV International Materials Research Congress (IMRC)	CANCÚN, QUINTANA ROO, MÉXICO 2016
Morphology and optical activity in ligand-protected noble metal nanoparticles Francisco Hidalgo and Cecilia Noguez	Charla Invitada
Spinograph Workshop 2016	MADRID, ESPAÑA 2016
First-principles calculations of electronic band structure of graphene adsorbed on multilayered WS <sub>2</sub> Francisco Hidalgo, José Silva, Miguel Pruneda and Pablo Ordejón	Póster
Int. Conf. on Optics of surfaces and Interfaces 11, OSI11 (Charla invitada)	AUSTIN, TEXAS; USA 2015
Understanding optical activity in LPNMNPs: intrinsic and geometric chirality Francisco Hidalgo and Cecilia Noguez	Presentación oral

## Arbitraje en revistas

Revista

Chemical Physics Letters

PARÁMETRO DE IMPACTO

1.839

---

## Docencia

UNAM/Facultad de ciencias

Electromagnetismo I

Introducción a la Física Cuántica

PROFESOR-DISCUTIDOR (LICENCIATURA EN FÍSICA);

Enero 2014 – Julio 2014

Agosto – Diciembre 2013

UNAM/Instituto de Física

Mecánica Cuántica I

Mecánica Cuántica I

Estado Sólido

Física Estadística I

AYUDANTE DE PROFESOR (POSGRADO EN CIENCIAS (FÍSICA))

Enero – Julio 2013

Agosto – Diciembre 2012

Enero – Julio 2012

Agosto – Diciembre 2011

DGETI-SEP/CETis 8

Matemáticas

Todos los cursos de Matemáticas a nivel medio superior: Álgebra, Geometría y Trigonometría, Geometría Analítica, Cálculo Diferencial y Cálculo Integral.

Física

Todos los cursos de Física a nivel medio superior: Física I, Física II, Física III, Temas de Física y Física Aplicada.

---

PROFESOR DE ASIGNATURA (BACHILLERATO)

Agosto 1994 – Julio 2011

Agosto 1994 – Julio 2011

## Actualización docente

DGETI-SEP

Diplomado en Competencias Docentes en el Nivel Medio Superior;

Universidad La Salle; 2010

Curso: Técnicas de Estudio para Docentes;

DGETI 2010

Curso: Elaboración de Prototipos Didácticos y Tecnológicos mediante el uso de Software;

DGETI 2006

UNAM/Facultad de ciencias

Curso: Nuevas tendencias en la enseñanza de la Física;

Escuela Mexicana de Física, 1998

---

## Divulgación de la ciencia

DGETI-SEP

Conferencias, talleres, cine-debate

SEMANA NACIONAL DE LA CIENCIA Y LA TECNOLOGÍA

DGETI; 2000 – 2010

Cámara de Diputados/Comisión de educación pública y servicios educativos

Conferencia: Perspectivas de la ciencia en la educación media superior: necesidades y respuestas;

Universidad Autónoma de Sinaloa, 2004

---

## Habilidades

**Especialidades técnicas:** Manejo de procesadores de texto (Word y equivalentes), hojas de cálculo (Excel y equivalentes), diseño de presentaciones (Powerpoint y equivalentes). Lenguaje de programación Fortran, nociones básicas de programación en paralelo, LaTeX, software de cristalografía como CrystalMaker, Vesta y XCrysDen. Software para análisis de datos como ProFit y DataGraph.

**Idiomas:** Castellano (*lengua materna*), English (*escritura, lectura y charla científica y coloquial*).

---

## Intereses

**En general y sin ningún orden de relevancia:** Historia de la ciencia, filosofía, historia de las ideas, pedagogía, enseñanza de las ciencias.

## Plan de Trabajo

**Dr. Francisco Javier Hidalgo Moreno**  
**Universidad Autónoma Metropolitana, Azcapotzalco**

### **Docencia**

Impartir UEA bajo la responsabilidad del Departamento de Ciencias Básicas, tales como: Introducción a la Física, Cinemática y Dinámica de Partículas, Dinámica del Cuerpo Rígido, Introducción a la Electroestática y Magnetostática, Termodinámica, Dinámica Aplicada, Física Moderna, Campos I, Campos II, Electromagnetismo, Física del Estado Sólido y demás que el Departamento de Ciencias Básicas requiera. Además, apoyar las UEA del Posgrado en Ciencias e Ingeniería de Materiales, tales como: Física de Materiales, Estado Sólido, Química Cuántica, etc.

### **Formación de recursos humanos**

Se estimulará el interés de los alumnos a través de seminarios y desarrollo de investigaciones con fines de publicación, así como el apoyo a Proyectos de Integración, Tesis de Maestría y Doctorado en el Área de Investigación de Física Atómica Molecular Aplicada.

### **Investigación**

**Proyecto:** Influencia del ángulo relativo entre bicapas de grafeno en la energía de adsorción de alcanotioles

### **Introducción**

El grafeno, la capa bidimensional monoatómica de átomos de carbono arreglados en una red hexagonal (tipo panel) a través de enlaces  $sp^2$ , es considerado uno de los materiales más atractivos en la actualidad. Desde que fue sintetizado en 2004 [1], se han propuesto múltiples aplicaciones en diversas áreas, como lo es el diseño de nuevos dispositivos electrónicos, análisis electroquímico, diseño de biosensores, nuevos materiales con novedosas propiedades mecánicas, entre otras [2-5]. El auge en estudios teóricos y experimentales de posibles aplicaciones está sustentado en sus notables propiedades físicas: una elevada proporción superficie-volumen, una alta conductividad térmica y eléctrica incluso a temperatura ambiente, una alta movilidad, etc. [2-6].

Muchos estudios han propuesto la posibilidad de modificar las propiedades físicas del grafeno a través de defectos de grano [7], dopaje, así como mediante el apilamiento con otros materiales bidimensionales [8-13]. Igualmente, se ha propuesto que las propiedades del grafeno se pueden modificar cubriendo su superficie con diferentes ligandos orgánicos, principalmente que contengan el grupo tiol, en un proceso denominado autoensamblaje, similar al generado en superficies metálicas de oro [14]. Tales sistemas autoensamblados en grafeno se han propuesto en el desarrollo de nuevos dispositivos electrónicos como transistores de efecto de campo [14].

Por otro lado, todos los estudios realizados en torno al grafeno, han ayudado a sintetizar otros materiales bidimensionales [8-11]. A diferencia del grafeno, los dicalcogenuros de

metales de transición, que también pueden sintetizarse en monocapas, exhiben carácter metálico, semiconductor o aislante [8-11,15], lo cual los convierte en excelentes candidatos para formar heteroestructuras verticales capaces de exhibir propiedades físicas diferentes a sus componentes en monocapas y en volumen. Además, también el estudio de defectos de frontera de grano, huecos o sustituciones modifica de manera importante sus propiedades [8-11,16-18].

Recientemente a través de un estudio teórico-experimental, Kim y colaboradores [19] reportaron una fuerte dependencia en el espectro de dicroísmo circular electrónico respecto al ángulo relativo entre capas de grafeno apiladas en un ordenamiento quirál. Si la respuesta quiróptica en bicapas de grafeno está directamente relacionada con el ángulo relativo entre ellas, es correcto asumir que otras propiedades físicas o químicas podrían estar relacionadas con dicha orientación entre bicapas.

### **Hipótesis**

Debido a que los estados  $p_z$  del carbono en el grafeno se encuentran ubicados alrededor del nivel de Fermi, su ocupación será modificada en función del ángulo relativo entre capas. Por lo tanto, su energía de adsorción de ligandos orgánicos que contengan el grupo tiol será modificada en función del ángulo relativo entre capas.

### **Objetivo General**

Analizar la influencia del ángulo relativo entre bicapas de grafeno en la energía de adsorción de alcanotioles

### **Objetivos Específicos**

1. Analizar la influencia en la energía de adsorción de un alcanotiol sobre una monocapa de grafeno respecto del sitio de adsorción.
2. Determinar la dependencia del tipo de apilamiento entre bicapas de grafeno (AA o AB) en la energía de adsorción de un alcanotiol.
3. Analizar la influencia del ángulo relativo entre bicapas de grafeno en la energía de adsorción de un alcanotiol.
4. Comparar la modificación en las energías de adsorción de un alcanotiol en función del sitio de adsorción debido al rompimiento de simetría asociado al ángulo relativo entre las bicapas de grafeno.

### **Metodología**

El presente trabajo se realizará mediante la Teoría del Funcional de la Densidad (Density Functional Theory, DFT), la cual ha demostrado su enorme potencial en la descripción estructural de sistemas periódicos laminados, así como en el estudio de propiedades electrónicas de metales, semimetales y semiconductores [15]. Dentro de la familia de alcanotioles, se considerará únicamente el uso del metanotiol (SHCH<sub>3</sub>) como ligando adsorbido dada su sencillez estructural. Diferentes estudios muestran que la adsorción del alcanotiol en la superficie metálica se lleva a cabo a través del átomo de azufre

mediante la liberación de hidrógeno (desprotonización) [14], siendo entonces adsorbido el radical metiltiol (SCH<sub>3</sub>) sobre la superficie. Por ello, como primer paso, se realizará un estudio de la energía de adsorción del metiltiol sobre la monocapa de grafeno explorando los diferentes sitios de adsorción (*top*, *bridge* and *hole*). Dado que es importante minimizar la interacción entre ligandos, es necesario también explorar diferentes superceldas de grafeno y asociar diferentes concentraciones de ligandos por unidad de superficie. Debido a que la adsorción del ligando puede influir en la red hexagonal del grafeno, se debe realizar un estudio de relajación estructural para entender la distorsión en la monocapa de grafeno inducida tras la adsorción.

Aunque el funcional de intercambio-correlación influye en la descripción física de los sistemas [15], en el presente trabajo se considerará inicialmente funcionales de intercambio- correlación dentro de la aproximación de la densidad local (*local density approximation*, LDA) debido a que las propiedades físicas de las monocapas de grafeno son mejor modeladas respecto a otros funcionales [15]. Sin embargo, durante el desarrollo del trabajo se evaluará la posibilidad de emplear otros funcionales, por ejemplo, dentro de la aproximación del gradiente generalizado (*generalized gradient approximation*, GGA).

Debido a que en el estudio de estos sistemas laminados se emplean superceldas que pueden contener muchos átomos, los cálculos de primeros principios podrían exigir una alta demanda computacional. Por ello, es muy importante encontrar criterios de convergencia que minimicen los cálculos pero que, al mismo tiempo, generen resultados confiables. Este estudio también debe realizarse.

Una vez realizado el estudio de la energía de adsorción del metiltiol sobre la monocapa de grafeno, añadiremos una segunda capa de grafeno en apilamiento AA y AB, lo cual significa un ángulo relativo entre capas de 0°. De esta manera, compararemos la influencia del apilamiento en bicapas de grafeno en las energías de adsorción del metiltiol. Posteriormente, rotaremos una de las capas de grafeno respecto al eje perpendicular a las monocapas de tal manera que exista un ángulo relativo entre ellas diferente a 0°. En el caso de bicapas rotadas, el tamaño de la supercelda necesaria para asegurar conmensurabilidad (esto es, que cumpla las condiciones de periodicidad) puede reducirse induciendo condiciones de tensión/compresión. Sin embargo, esto puede influir en las propiedades físicas de la bicapa. Por ello, resulta necesario explorar los diferentes tamaños de supercelda de bicapas rotadas tales que se encuentren a condiciones de tensión/compresión prácticamente nulas. Una vez establecidas las superceldas a diferentes ángulos relativos entre capas, debe realizarse el estudio de adsorción en los diferentes sitios (*top*, *bridge* y *hole*) tomando en cuenta que debido a la ruptura de simetría los sitios ya no son equivalentes.

Para la realización de este proyecto, se usará principalmente el código SIESTA (*Spanish Initiative for Electronic Simulations with Thousand of Atoms*) [20], basado en la DFT y que tiene la ventaja de utilizar una base de orbitales atómicos numéricos estrictamente localizados lo que permite realizar simulaciones de estructuras atómicas relativamente grandes. Además, SIESTA utiliza pseudopotenciales que conservan la norma (*norm-conserving*) para simular las interacciones ión-electrón, lo que reduce la demanda

computacional respecto a cálculos “*all-electron*”. Sin embargo, es posible que en el desarrollo del trabajo se considere el empleo de otros códigos de primeros principios como VASP (The Vienna Ab initio simulation package) [21], que utiliza ondas planas como base de orbitales y que pueden complementar el estudio de las propiedades físicas. Los cálculos se realizarán utilizando el cómputo disponible en la UAM-Azcapotzalco.

Por otro lado, este trabajo se realizará en colaboración con la Dra. Cecilia Noguez del Instituto de Física de la UNAM. En caso de que durante el proyecto se requiera mayor tiempo de cómputo, se podría utilizar el equipo que tiene a su disposición.

### **Productos de trabajo.**

El presente proyecto está programado para realizarse en el transcurso de doce meses. Al término de este periodo, con los resultados alcanzados se planea publicar un artículo científico en una revista internacional de alto impacto. También está contemplada la posibilidad de asistir a algún congreso internacional para presentar los resultados parciales.

### **Recursos disponibles**

Para realizar los cálculos propuestos se cuenta con la licencia de los códigos VASP y SIESTA, así como los recursos de cómputo necesarios.

1. Laboratorio de cómputo ubicado en el edificio HP-007 del Área de Física Atómica Molecular Aplicada del Departamento de Ciencias Básicas de la UAM-Azcapotzalco.
2. Clúster Fismol8 con un nodo maestro y 9 nodos de trabajo, con sistema operativo Rocks (x86-64bits SMP, sobre el sistema operativo CentOS 4.2) con 60 núcleos AMD Phenom II y 64 GB en memoria RAM.
3. Estación de trabajo Molphys con 4 procesadores físicos (64 cores) AMD Interlagos Opteron 6200 y 148 GB en memoria RAM, con el sistema operativo CentOS 5.1.
4. Estación de trabajo Fismol10 con 4 procesadores físicos (16 cores) AMD y 32 GB en memoria RAM, con el sistema operativo CentOS 4.2.
5. Estación de trabajo Fismol12 con 4 procesadores físicos (16 cores) AMD y 32 GB en memoria RAM, con el sistema operativo CentOS 4.2.
6. Acceso al clúster ABACUS: Laboratorio de Matemáticas Aplicadas y Cómputo de Alto Rendimiento del Departamento de Matemáticas del CINVESTAV.

## Calendario de actividades

Actividad	Mes											
	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Revisión bibliográfica	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
Construir modelos de monocapas de grafeno con un ligando adsorbido.	■											
Estudiar los parámetros de convergencia para la simulación.	■	■										
Obtener la energía de adsorción del ligando sobre la monocapa de grafeno en función del sitio de adsorción.		■	■	■	■							
Construir modelos de bicapas de grafeno con ángulo relativo de 0° con un ligando adsorbido.					■							
Obtener la energía de adsorción del ligando sobre la bicapa de grafeno con ángulo relativo de 0° en función del sitio de adsorción.					■	■	■	■				
Construir modelos de bicapas de grafeno con ángulo relativo distinto de 0° con un ligando adsorbido.					■							
Obtener la energía de adsorción del ligando sobre la bicapa de grafeno con ángulo relativo distinto de 0° en función del sitio de adsorción.					■	■	■	■				
Análisis de resultados.	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■	■
Escritura de artículo científico.										■	■	■
Participación en un evento académico.										■	■	■

## Referencias

1. Novoselov, K. S.; et. al., Electric field effect in atomically thin carbon films; *Science* 306, 666 (2004).
2. Geim, A. K. and Novoselov, K. S., The rise of graphene; *Nature Mat.* 6, 183 (2007).
3. Rao, C. N. R.; et. al., Graphene: The new two-dimensional nanomaterial; *Angew. Chem. Int. Ed.* 48, 7752-7777 (2009).
4. Geim, A. K.; Graphene: status and prospects; *Science* 324, 1530 (2009).
5. Zhan, B.; et. al., Graphene field-effect transistor and its application for electronic sensing; *Small* 10, 4042-4065 (2014).
6. Castro Neto, A. H.; et. al., The electronic properties of graphene; *Rev. Mod. Phys.* 81, 109 (2009).
7. Lahiri, J.; et. al., An extended defect in graphene as metallic wire; *Nat. Nanotech.* 5, 326 (2010).
8. Butler, S. Z.; et. al., Progress, challenges, and opportunities in two-dimensional materials beyond graphene; *ACS Nano* 7, 2898-2926 (2013).
9. Geim, A. K. and Grigorieva, I. V., Van der Waals heterostructures; *Nature* 499, 419 (2013).
10. Li, M. Y.; et. al., Heterostructures based on two-dimensional layered materials and their potential applications; *Materials Today* 19, 322-335 (2016).
11. Niu, T. and Li, A., From two-dimensional materials to heterostructures; *Prog. Surf. Sc.* 90, 21-45 (2015)
12. Georgiou, T.; et. al., Vertical field-effect transistor based on graphene-WS<sub>2</sub> heterostructures for flexible and transparent electronics; *Nat. Nanotech.* 8, 100 (2013).
13. Gan, T. and Hu, S., Electrochemical sensors based on graphene materials; *Microchim Acta* 175, 1-19 (2011).
14. Newton, L.; et. al., Self assembled monolayers (SAMs) on metallic surfaces (gold and graphene) for electronic applications; *J. Mater. Chem. C* 1, 376 (2013).
15. Roldán, R.; et. al., Electronic properties of single-layer and multilayer transition metal dichalcogenides MX<sub>2</sub> (M = Mo, W; X = S, Se); *Ann. Phys.* 526, 347-357 (2014).
16. Kumar, A. and Ahluwalia, P. K., Tunable dielectric response of transition metals dichalcogenides MX<sub>2</sub> (M = Mo, W; X = S, Se, Te): Effect of quantum confinement; *Physica B* 407, 4627-4634 (2012).
17. Cho, K.; et. al., Electrical and optical characterization of MoS<sub>2</sub> with sulfur vacancy passivation by treatment with alkanethiol molecules; *ACS Nano* 9, 8044-8053 (2015).
18. Zibouche, N.; et. al., Transition-metal dichalcogenides for spintronic applications; *Ann. Phys.* 526, 395-401 (2014).
19. Kim, C. J.; et. al., Chiral atomically thin films; *Nature Nanotech.* 11, 520-524 (2016).
20. Soler, J. M., et al., The SIESTA method for ab initio order-N materials simulations; *J. Phys.: Condens. Matter* 14, 2745 (2002).
21. G. Kresse and J. Furthmüller. Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set. *Comput. Mat. Sci.*, 6:15, (1996); G. Kresse and J. Furthmüller. Efficient iterative schemes for ab initio total-energy calculations using a plane-wave basis set. *Phys. Rev. B*, 54:11169, (1996). <https://www.vasp.at/>.