



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO**  
**ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS SUPERIORES, UNIDAD MORELIA**  
**DEPARTAMENTO DE SERVICIOS ESCOLARES**

**FORMATO PARA REGISTRO DE OPCIÓN DE TITULACIÓN**

ESCRIBE TU OPCIÓN SOLICITADA			
<b>Tesis</b>			
DATOS DEL ESTUDIANTE			
<b>Vega</b>		<b>Gutiérrez</b>	
Apellido Paterno		Apellido Materno	
<b>415028707</b>		<b>Licenciatura en ciencia de materiales sustentables</b>	
Número de cuenta		Carrera en la que te encuentras inscrito(a)	
<b>miguelvgz_90@hotmail.com</b>		<b>miguelvgz90@gmail.com</b>	
Correo electrónico 1		Correo electrónico 2	
<b>2 74 68 59</b>		<b>4431 45 67 83</b>	
Teléfono domicilio		Teléfono oficina	
		Teléfono celular	
DATOS DEL TUTOR (Sólo si se requiere según tu opción de titulación)			
<b>Doctorado</b>	<b>Claudia</b>	<b>Briones</b>	<b>Jurado</b>
Grado	Nombre(s)	Apellido Paterno	Apellido Materno
<b>Escuela nacional de estudios superiores, unidad Morelia.</b>			
Dependencia UNAM o Institución en la que labora			
<b>308 67 31</b>		<b>6893-500, Ext 80603</b>	
Teléfono domicilio		Teléfono oficina	
<b>brionesjurado@enesmorelia.unam.mx</b>		<b>brionesjurado@gmail.com</b>	
Correo electrónico 1		Correo electrónico 2	
DATOS DEL CO-TUTOR (solo si se requiere según tu opción de titulación)			
Grado	Nombre(s)	Apellido Paterno	Apellido Materno
Dependencia UNAM o Institución en la que labora			
Teléfono domicilio		Teléfono oficina	
		Teléfono celular	
Correo electrónico 1		Correo electrónico 2	

DATOS DE LA INSTITUCIÓN EN LA QUE LLEVÓ A CABO EL TRABAJO PROFESIONAL O EL SERVICIO SOCIAL		
Nombre de la Institución		Periodo en el que realizó la actividad
TÍTULO DEL TRABAJO ESCRITO		
Nucleación de cúmulos de iridio soportados en montmorillonita por medio de cálculos ab-initio		
FIRMAS		
		
Firma del Alumno	Firma del Tutor	Firma del Co-Tutor
Nombre y firma del(a) Coordinador(a) de la carrera		
APROBADO (X)	Vo. Bo.  Jose Nunez Gonzalez Nombre y firma del(a) Coordinador(a) de la carrera	 ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS SUPERIORES UNIDAD MORELIA DEPARTAMENTO DE SERVICIOS ESCOLARES  13 JUN. 2018  <b>RECIBIDO</b> Dpto. Servicios Escolares
CONDICIONADO ( )		
RECHAZADO ( )		

ATENTAMENTE  
 "POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"  
 Morelia, Michoacán a, 30 de Mayo de 2018.

NOTA: Para solicitar el Registro de Opción de Titulación, el alumno deberá anexar al presente formato:

- Historial académico (no oficial)
- Resumen del proyecto académico (para opciones de titulación que requieran jurado)



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

---

ESCUELA NACIONAL DE ESTUDIOS SUPERIORES

NUCLEACIÓN DE CÚMULOS DE  
IRIDIO SOPORTADOS EN  
MONTMORILLONITA POR MEDIO DE  
CÁLCULOS AB-INITIO

Protocolo de tesis

Alumno:

Miguel Angel Vega Gutierrez

Asesora:

Claudia Briones Jurado

Morelia, Michoacán 30 de mayo 2018



ESCUELA  
NACIONAL  
de ESTUDIOS  
SUPERIORES  
  
UNIDAD MORELIA

# Índice

1. Introducción	2
2. Antecedentes	4
3. Justificación	7
4. Hipótesis	7
5. Planteamiento del problema	8
6. Objetivos	9
6.1. Objetivo general . . . . .	9
6.2. Objetivo específico . . . . .	9
7. Metodología	10
8. Cronograma de trabajo	12
Referencias	13

# 1. Introducción

El punto actual en el que se encuentra la contaminación global requiere de nuevas tecnologías o procedimientos que sean capaces de frenar la problemática ambiental y posteriormente, de ser posible, reducir los impactos al mínimo. El problema de la contaminación afecta a los ecosistemas lo cual reduce la calidad de vida de los seres vivos que lo habitan. Es de gran importancia que las tecnologías modernas no generen, a su vez, nuevos problemas a resolver.

Uno de los retos es lograr la degradación de los contaminantes en el ambiente en el cual se encuentran, dicha degradación se da de forma natural pero presenta ciertos problemas como los largos tiempos para que este proceso ocurra de manera natural y la generación de otros productos dañinos para el ambiente resultado de la descomposición de los contaminantes. Una solución con la cual se pueden controlar los tiempos de descomposición y los productos obtenidos de esta misma es la catálisis que es, además, considerada uno de los pilares fundamentales de la química verde.

La velocidad a la cual se dan las reacciones químicas puede ser controlada por un catalizador, que es una sustancia que no forma parte ni de los reactantes ni de los productos y su papel es disminuir las energías de activación del o los estados de transición [1, 2]. Las reacciones pueden ser de carácter homogéneo o heterogéneo, en palabras de Levenspiel "... es homogénea si se realiza en una sola fase, y es heterogénea si, al menos, se requiere la presencia de dos fases..." [2]. El tipo de catálisis más adecuado para causar menores impactos negativos al medio ambiente es la heterogénea, porque permite disminuir o eliminar el uso de disolventes y el catalizador se puede recuperar empleando métodos de separación físicos.

Desde principios del siglo XIX, Humphry Davy se dio cuenta de que la presencia de platino promovía la reacción entre el hidrógeno y el oxígeno para formar agua; desde entonces, diversos metales de transición fueron probados como catalizadores. Por ejemplo, actualmente los metales platino, rodio y paladio se utilizan en los convertidores catalíticos de los automóviles para oxidar el monóxido de carbono y reducir los diferentes óxidos de nitrógeno que se generan en los motores [3]. Todos estos metales fueron usados en su forma macroscópica y en esta escala, el oro no presenta actividad catalítica y es muy inerte desde el punto de vista químico. Sin embargo, en 1989 Haruta et al [4] sintetizaron nanopartículas de oro sobre varios óxidos y encontraron que con este tamaño de partícula, el oro, otrora inerte, cataliza la reacción de oxidación del monóxido de carbono incluso a una temperatura de -70 °C.

En la actualidad las propiedades catalíticas de las nanopartículas metálicas (principalmente metales preciosos) son de gran importancia dentro de la catálisis heterogénea, las cuales de manera general se preparan para que queden soportadas en las superficies de materiales inorgánicos que pueden contribuir al comportamiento catalítico de las nanopartículas y que ayudan a estabilizarlas reduciendo la sinterización de estas [5, 6].

Las nanopartículas de los metales de transición se han soportado en varios óxidos: de titanio, de magnesio, férrico, de zirconio, de cerio. También se han soportado en alúmina, sílice, zeolitas y minerales arcillosos. Los minerales arcillosos tienen la ventaja de ser más amigables con el medio ambiente que otros soportes. Los sistemas de nanopartículas de metales preciosos (NPs) soportados en materiales arcillosos han sido aplicados en diversas áreas de la ciencia, como lo son las ciencias médicas-biológicas, petrolíferas, químicas,

entre otras. La montmorillonita (MMT) es uno de los minerales arcillosos que más se ha utilizado en la industria [7, 8, 9]. Se ha observado que el óptimo desempeño de los sistemas catalíticos metal-soporte depende altamente de su síntesis así como la morfología, forma, carga superficial, pureza de los precursores [10], y su interacción con el soporte. En la actualidad, los estudios teóricos de los sistemas catalíticos son de gran ayuda para explicar y entender los resultados experimentales. En particular, para estudiar sistemas químicos, uno de los formalismos que más se utilizan es el de la Teoría de los Funcionales de la Densidad (TFD). Empleando esta teoría se han podido obtener las estructuras más probables de muchas moléculas y sistemas periódicos, así como las propiedades electrónicas relacionadas con su reactividad.

Considerando lo anterior en el presente trabajo se buscara, por medio de la Teoría de los funcionales de la Densidad (TFD), las estructuras de mínima energía de cúmulos de iridio con el fin de presentar resultados nuevos sobre este sistema no estudiado previamente (hasta donde se sabe), y conocer el posible desempeño de este sistema como catalizador a través del conocimiento de sus propiedades electrónicas.

## 2. Antecedentes

En 1959 Richard Feynman habló sobre las posibilidades de manipular y controlar las cosas desde las escalas pequeñas y se preguntó *cuáles podrían ser las propiedades que presentarían los materiales al poder ser acomodados átomo por átomo en posiciones deseadas* [11, 12]. Se tiene la creencia de que los comentarios de Feynman fueron la antesala del desarrollo de la nanotecnología, debido al incremento en esta rama posterior a la fecha de su plática; en la actualidad estos procesos son posibles y abrieron un gran campo de investigación.

Las nanoestructuras se refieren a estructuras menores a los 100 nm, las cuales se encuentran dominadas por comportamientos cuánticos; los materiales nanométricos presentan comportamientos distintos a su contraparte macroscópica. En el área de los catalizadores, el resultado encontrado por Haruta y colaboradores reportado en 1989, abrió la posibilidad de emplear nanopartículas metálicas dispersas sobre óxidos metálicos.

En el diseño de estos catalizadores es importante la selección de un soporte adecuado y de las nanopartículas metálicas que estarán soportadas en este, lo ideal es poder optar por opciones que sean amigables con el medio ambiente y cuyas nanopartículas tengan poca tendencia a unirse entre ellas; esto último resulta muy importante ya que la acumulación de nanopartículas puede llevar al incremento de tamaño de partícula, perdiendo así las características que lo hicieron útil en primera instancia.

Las arcillas naturales al formarse presentan sustitución isomorfa entre sus hojas tetraédricas y octaédricas, generando cambios en las propiedades de su superficie como intercambio iónico o acidez, esto las hace óptimas para funciones catalíticas [7]. La montmorillonita (MMT) es una arcilla natural que presenta todas estas propiedades, además de no ser tóxica para el medio ambiente.

La MMT es un mineral arcilloso que pertenece al grupo de las esmectitas y estas a su vez, forman parte de la familia de los filosilicatos. A primera vista la estructura de la MMT parece compleja, sin embargo, puede ser entendida si se aprecia que está conformada por tetraedros de silicio y octaedros de aluminio. Los tetraedros de silicio ( $\text{SiO}_4^-$ ) comparten tres de sus átomos de oxígeno con tetraedros vecinos formando cavidades hexagonales. Por otro lado, la unión de octaedros de aluminio ( $\text{AlO}_6^{3-}$ ) da como resultado, una hoja octaédrica que, en la MMT, tiene ocupadas dos tercios de las posiciones del catión central. La estructura de la MMT se puede observar en la figura 1.

La MMT tiene una estructura, llamada capa 2:1, en la que una hoja octaédrica se encuentra en medio de dos hojas tetraédricas. De manera natural presenta sustituciones isomorfas de  $\text{Al}^{3+}$  por  $\text{Mg}^{2+}$  en las hojas octaédricas y por lo tanto tiene exceso de carga negativa que se concentra principalmente en la superficie de las capas 2:1. La carga negativa se compensa por los cationes  $\text{Na}^+$ ,  $\text{K}^+$  y  $\text{Ca}^{2+}$ . El exceso de carga negativa en la superficie y su capacidad de intercambio catiónico son las causas de las propiedades fisicoquímicas de la MMT.

Las capas 2:1 de la MMT están separadas por un espacio interlaminar, que puede ser de longitud variable dependiendo del nivel de hidratación. Se han podido preparar nanopartículas de Cu, Ni, Ru, Pd, Pt, Ag, Au y Rh en la MMT, [8, 10] pero hasta el momento no existe una investigación específica sobre la montmorillonita como soporte de nanopartículas de iridio, recientemente, el iridio ha resaltado por su capacidad para ser adsorbido en ciertos soportes, como especie monoatómica, es decir el sitio activo catalíticamente en estos

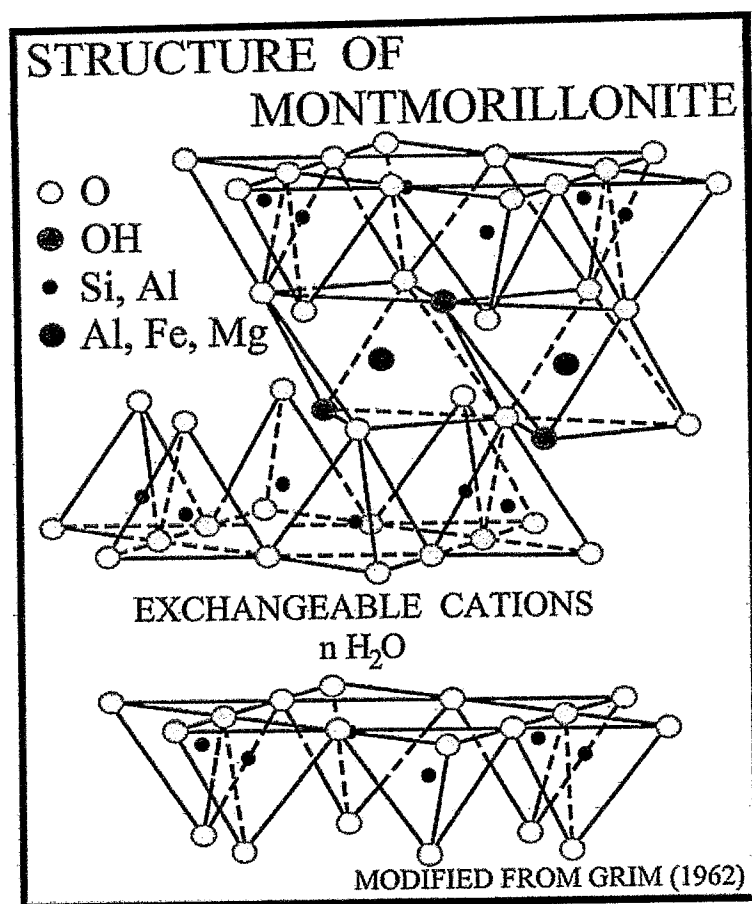


Figura 1: Estructura de la montmorillonita [17]

sistemas, es un solo átomo de iridio. Esto es relevante porque disminuye la cantidad del metal que se debe agregar en la preparación del catalizador y contribuye a mejorar la actividad catalítica [10]. Una investigación teórica sobre el funcionamiento catalítico de un sistema Ir-MMT podría abrir la puerta al mejor diseño y entendimiento de las futuras investigaciones prácticas de síntesis de nanopartículas de iridio sobre MMT.

El estudio teórico de sistemas nanoestructurados presenta dificultades ya que se trata de sistemas químicos complejos, y obtener un modelo de las interacciones entre todos los componentes resulta, por lo tanto, difícil. El objetivo es obtener la función de onda del sistema para conocer su energía. Introducir todo esto en un hamiltoniano hace que los cálculos sean muy costosos. Una primera aproximación para solucionar este problema consiste en utilizar valores empíricos, aquellos conocidos previamente por experimentos, pero esto se ve descartado rápidamente por qué no puede haber variaciones fuera del entorno en el que estos valores fueron obtenidos [13, 14].

El uso de métodos *ab initio* para este objetivo consiste en un hamiltoniano que contenga los valores experimentales que sean los valores de las constantes físicas fundamentales [13]. Existen varios formalismos, desde el método Hartree-Fock, cuyo problema es que no toma en cuenta la energía de correlación electrónica y aquellos post Hartree-Fock que mejoran la deficiencia del primero. Los métodos basados en Hartree-Fock trabajan en la búsqueda de la mejor función de onda para el sistema, a partir de una función de onda de prueba. Sin embargo, los métodos post Hartree-Fock son muy costosos en cuanto a recursos computacionales. Un método que incorpora la energía de correlación electrónica con menor tiempo de



cómputo es la teoría de los funcionales de la densidad (TFD).

La TFD no busca la mejor función de onda, sino que trabaja con la densidad como un funcional de la energía y, a partir de una densidad de prueba se busca la densidad correspondiente a la de menor energía a través de un cálculo de campo autoconsistente. La TFD surge de los trabajos independientes de distintos científicos en diferentes periodos de tiempo, se podría marcar su raíz en el trabajo donde Lord Kelvin, quien trata los electrones como un gas. También son notables los métodos estadísticos de Enrico Fermi para sistemas periódicos de elementos, así como la publicación de Levy sobre densidades de electrones para Hamiltonianos, entre muchas otras investigaciones para llegar finalmente a la formulación de Hohenberg-Kohn—Sham, la cual se basa en 2 teoremas:

1. Teorema 1: Existe una correspondencia uno a uno entre la densidad del estado base de un sistema de muchos electrones y el potencial externo que se genera al suponer la aproximación de Born-Oppenheimer.

El corolario del primer teorema es que, dado que la densidad electrónica determina el potencial, entonces, también determina la función de onda del estado base. Como consecuencia inmediata se tiene que el valor esperado del estado base de cualquier observable, es un único funcional de la densidad electrónica exacta del estado base.

2. Teorema 2: La energía del estado base puede ser obtenida variacionalmente. La densidad que minimiza la energía total es precisamente la densidad del estado base.

Esto permite observar la reducción de las variables con las cuales se debe trabajar para obtener las energías y la densidad electrónica que proporcionarán las respuestas deseadas.

### 3. Justificación

El uso de métodos de la química verde es de gran importancia en los tiempos actuales, ya que se espera con esto poder frenar el deterioro ecológico actual, mediante la aplicación de sus 12 principios, los cuales consideran la ruta de síntesis, análisis y procesos químicos, así como la utilización de materias primas no tóxicas y renovables [15]. En el caso de la síntesis verde es de gran importancia el diseño de métodos para obtener materiales nanoestructurados que consideren las necesidades de una síntesis verde, de tal forma que se puedan tener materiales no contaminantes (de principio a fin) y que conserven sus propiedades únicas, tal como sus propiedades como catalizadores.

En este sentido el uso de minerales arcillosos como soporte de nanopartículas metálicas en la preparación de catalizadores, contribuye a disminuir el impacto ambiental de estos. Por sus propiedades fisicoquímicas, la MMT es una buena opción porque ya existen antecedentes de preparación de nanopartículas metálicas en este mineral arcilloso. En el territorio nacional, la MMT se encuentra principalmente en Durango y zonas dorsales del pacífico central. En este trabajo es de interés estudiar la nucleación de cúmulos de iridio sobre MMT porque sus especies monoatómicas y cúmulos no tienden a agregarse, como otros metales, para formar partículas más grandes.

El estudio de las propiedades electrónicas del sistema Ir-MMT resulta importante para predecir las propiedades catalíticas de este material nanoestructurado que todavía no ha sido preparado experimentalmente, hasta donde se tiene conocimiento. Se sabe que las nanopartículas de iridio tienden a agregarse poco sobre soportes como el óxido de titanio y de magnesio, pero no se han realizado investigaciones sobre un soporte de MMT; se espera que los resultados que se obtengan de esta investigación permitirán conocer teóricamente la actividad catalítica del sistema Ir-MMT y considerar su posible aplicación como catalizador.

Conocer el comportamiento teórico del sistema Ir-MMT puede llevar a una mejor selección de los precursores y del método de síntesis, además que se conocerían las propiedades catalíticas del sistema para ser aplicadas a métodos de absorción de contaminantes; y al ser la MMT un material amigable con el medio ambiente se puede esperar que el sistema sea aplicado para ecotecnologías.

### 4. Hipótesis

Se espera que las cavidades hexagonales presentes en la estructura de la MMT sean sitios propicios para la nucleación de cúmulos de iridio y probablemente sean adecuados para formar especies monoatómicas de iridio adsorbidas en este mineral arcilloso.

## 5. Planteamiento del problema

Los materiales nano-estructurados presentan propiedades distintas a sus análogos macroscópicos, sin embargo, al momento de ser sintetizados se presentan dificultades debido a la tendencia que tienen las nanopartículas metálicas para agregarse. Así mismo, los soportes son caros y algunos son dañinos para el medio ambiente. Por lo anterior, es importante buscar soportes que puedan disminuir la cantidad de metales a utilizar, que logren estabilizar las nanopartículas y que tengan menor impacto negativo ambiental. En la experimentación con diversas nanopartículas metálicas, se ha encontrado que el iridio tiene poca tendencia a agregarse para formar partículas más grandes en ciertos soportes. Aunado a esto, se sabe que la MMT es un mineral amigable con el ambiente y ya existen antecedentes de que se pueden preparar nanopartículas sobre este mineral arcilloso.

Hasta donde se sabe, no se han preparado nanopartículas de iridio sobre montmorillonita, ni tampoco se han reportado resultados de estudios TFD sobre este sistema. El iridio es un metal de transición de interés debido a que se ha observado que presenta una baja sinterización en algunos soportes como alúmina y óxido de magnesio. Por lo tanto, en este trabajo se desea analizar la posibilidad de que la montmorillonita sea un soporte adecuado para obtener especies monoatómicas de iridio o cúmulos pequeños de este metal.

## 6. Objetivos

### 6.1. Objetivo general

Estudiar el proceso de nucleación de cúmulos de iridio sobre el mineral arcilloso montmorillonita (MMT), utilizando la teoría de los funcionales de la densidad (TFD) para entender y predecir el comportamiento catalítico de este sistema químico a partir de sus propiedades electrónicas, así como concluir sobre la posibilidad de tener especies monoatómicas de iridio sobre MMT.

### 6.2. Objetivo específico

1. Seleccionar el tipo de pseudopotencial más adecuado para llevar a cabo los cálculos con la TFD, como está implementada en el software libre Quantum Espresso.
2. Seleccionar la energía cinética de corte para que los cálculos sean lo más eficientes en tiempo y calidad de resultados.
3. Seleccionar el número de puntos K para obtener resultados adecuados y con un tiempo de cómputo aceptable.
4. Llevar a cabo la optimización de la geometría de menor energía para la montmorillonita con el catión sodio  $\text{Na}^+$ , así como la de los parámetros de la red.
5. Llevar a cabo la optimización geométrica del sistema de iridio soportado sobre montmorillonita ( $\text{Ir}_n\text{-MMT}$ ), donde  $n=1,2,3,4, 5$  y  $6$ , así como la de los parámetros de red.
6. Analizar las poblaciones de Löwdin, la densidad de estados y la energía de adsorción del iridio sobre la MMT de los cúmulos ( $\text{Ir}_n\text{-MMT}$ ).
7. Seleccionar algunos cúmulos para estudiar la adsorción de las moléculas de oxígeno y monóxido de carbono.

## 7. Metodología

El formalismo de esta investigación está basado en lo siguiente:

1. Pseudopotenciales: Los pseudopotenciales permiten sustituir las interacciones entre partículas que se encuentran detalladamente en los Hamiltonianos exactos; se busca que las eigenfunciones y eigenvectores sean más accesibles mediante códigos computacionales eficientes, los cuales pasaran por el Hamiltoniano exacto y consideraran que no toda la información en este es relevante para el sistema que se está estudiando; la premisa dentro de los pseudopotenciales es que solo los electrones de valencia son de interés para las reacciones químicas, es decir que todos los electrones más cercanos al núcleo se les puede considerar como inactivos, como lo que interesa son las reacciones químicas, los electrones cercanos al núcleo del núcleo pueden ser contenido en un pseudopotencial efectivo de núcleo, el cual reduce el trabajo para el sistema dejando solo los electrones en la capa de valencia [16].  
Los pseudopotenciales reducen el tiempo de computo al reducir la base sobre la que se está trabajando.
2. Quantum Espresso: Es un software conformado por códigos computacionales de tipo open Access, el cual sirve para realizar cálculos de energía para la estructura de diversos materiales en escalas nanométricas; su base de trabajo es la teoría de los funcionales de la densidad (TFD), ondas planas y pseudopotenciales. El software permite resolver las ecuaciones de *Kohn y Sham* para el sistema que el usuario le especifique, este sistema deberá tener coherencia física, y todas las especificaciones solicitadas en su archivo de entrada, tales como número de especies atómicas, pseudopotenciales, posiciones de las especies atómicas, energía de corte, tamaño del sistema, selección de puntos K; además de especificaciones para el ordenador, como la ruta de los pseudopotenciales y las carpetas donde se guardara de manera temporal los resultados. El software resulta de gran utilidad para sistemas complejos ya que permite que el usuario obtener las energías, magnetización y ordenamientos preferenciales del sistema, así como densidades de estados.

Conocido esto, la forma en que se realizará la investigación será la siguiente:

1. Selección de pseudopotenciales; se considerarán los aspectos de cada uno de los pseudopotenciales presentes en la página de Quantum Espresso para todos los elementos que formaran parte del sistema. Esta selección de pseudopotenciales vendrá de cálculos realizados previamente donde se observarán cuales presentan mejor comportamiento y menores energías, así como las energías de corte a las cuales se obtuvieron estos resultados.
2. Estructurar el sistema: conocidos los pseudopotenciales y sus respectivas energías de corte se estudiarán cuáles son los puntos K que mejor se acoplan a la investigación con el fin de poder reducir el tiempo de cálculo y optimizar el procedimiento; se introducirá el catión sodio para compensar el exceso de carga negativa generado por la sustitución isomorfa de  $\text{Al}^{3+}$  por  $\text{Mg}^{2+}$  y se realizaran los cálculos para conocer cuál es la geometría de mínima energía.

3. Posicionamiento de cúmulos: se agregarán uno por uno los átomos de iridio para formar el sistema completo Ir-MMT, esto se hará para conocer cómo varían las energías y conocer las geometrías más favorables. El aumento de tamaño de cúmulo traerá consigo variaciones en la red con la que se trabaja, lo cual deberá ser incluido en cada uno de los cálculos a realizar.
4. Resultados del sistema Ir-MMT: se considerarán todas las variaciones realizadas sobre el sistema para seleccionar el de mejor energía y obtener la densidad de estados de este. Se conocerá la energía de adsorción del iridio disperso en la MMT.
5. Pruebas de adsorción de moléculas de monóxido de carbono y de oxígeno: conocidos los resultados, se tomarán algunos de los sistemas para realizar los cálculos de adsorción de moléculas de monóxido de carbono y de oxígeno, con el fin de poder reportar la capacidad catalítica del sistema.

## 8. Cronograma de trabajo

El siguiente cronograma está pensado a 12 meses comenzando en julio del 2018 y terminando en junio del 2019.

### 1. JULIO:

1.1. Selección de pseudopotenciales y energías de corte para los elementos que conforman el sistema:

1.1.1. Al.

1.1.2. H.

1.1.3. Mg.

1.1.4. O.

1.1.5. Si.

1.1.6. Na.

1.1.7. Ir.

1.2. Cálculos de las densidades de estado para los elementos del sistema, así como las cargas de Lödwing.

### 2. AGOSTO:

2.1. Optimización de la supercelda de montmorillonita (MMT) con sodio como contra ion.

2.2. Optimización de los parámetros de la red (Red monoclinica a,b,c y ángulo beta).

2.3. Analizar las interacciones Ir-MMT en los casos:

2.3.1. Cálculos de MMT con un átomo de iridio de carga formal cero.

2.3.2. Estudio del dímero de iridio, Ir<sub>2</sub>, en la MMT.

2.3.3. Analizar la interacción Ir-Ir.

### 3. SEPTIEMBRE:

3.1. Cálculos Ir<sub>3</sub>-MMT.

3.2. Cálculos Ir<sub>4</sub>-MMT.

3.3. Cálculos Ir<sub>5</sub>-MMT.

3.4. Redactar el capítulo 1 de la tesis y enviar avances a la asesora.

### 4. OCTUBRE:

4.1. Cálculos Ir<sub>6</sub>-MMT.

4.2. Redactar el segundo capítulo de la tesis y enviar avances a la asesora.

### 5. NOVIEMBRE:

5.1. Seleccionar uno de los sistemas Ir<sub>n</sub>-MMT y estudiar la adsorción de CO Y O<sub>2</sub>.

### 6. DICIEMBRE:

6.1. Proponer posible mecanismo de oxidación de CO.

6.2. Redactar el tercer capítulo de la tesis y enviar avances a la asesora.

7. ENERO:

- 7.1. Proponer posible mecanismo de oxidación de CO, en caso de que los resultados previos sean favorables.
- 7.2. Entregar la versión más avanzada del primer capítulo de la tesis a la asesora.

8. FEBRERO:

- 8.1. Continuar con el estudio del mecanismo de oxidación de CO.
- 8.2. Entregar la versión más avanzada del segundo capítulo de la tesis a la asesora.

9. MARZO:

- 9.1. Continuar con el estudio del mecanismo de oxidación de CO.
- 9.2. Entregar la versión más avanzada del tercer capítulo de la tesis a la asesora, resultados de la nucleación de cúmulos de iridio.

10. ABRIL, MAYO y JUNIO:

- 10.1. Finalizar con la redacción de la tesis.
- 10.2. Procesos administrativos.

## Referencias

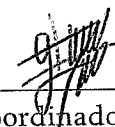
- [1] LAIDLER, K. & MEISER, J. (1998). *Cinética química II. Mecanismos compuestos*. En Fisico-química(P. 441). México: CECSA.
- [2] LEVENSPIEL, O. (2002). *Introducción*. En Ingeniería de las reacciones químicas(p. 5). México: Reverté.
- [3] LINDSTRÖM, B. & PETTERSSON, L. J. *CATTECH* 7, 2003, 130-138.
- [4] M.HARUTA, N.YAMADA, T.KOBAYASHI, S.IIJIMA *Journal of Catalysis* Volume 115, Issue 2, February 1989, Pages 301-309
- [5] HERNÁNDEZ, C. (2014). *Estructura y reactividad de nanopartículas de Ir y AuIr soportadas en TiO<sub>2</sub>*. México: UNAM.
- [6] MARTÍNEZ, R. (2011). *Síntesis de nanopartículas bimetálicas oro-iridio como catalizadores para la oxidación de CO*. México: UNAM.
- [7] SOBERANIS, L. (2000). *Síntesis y caracterización de catalizadores a base de arcillas pilareadas con óxido de circonio para la producción de Tame*. México: UNAM.
- [8] CASTILLO, N. (2009). *Preparación y caracterización química y estructural de las nanopartículas bimetálicas de platino y paladio depositadas en sílice*. México: UNAM.
- [9] MADSEN, F. (1997, enero 20). Clay mineralogical investigations related to nuclear waste disposal. *Clay Minerals*, 33, pp.109-129.
- [10] BAGCHI, B., THAKUR, P., KOOL, A., DAS, S. & NANDY, P. (2014, noviembre 7). In situ synthesis of environmentally benign montmorillonite supported composites of Au/Ag nanoparticles and their catalytic activity in the reduction of p-nitrophenol. *Royal Society of Chemistry*, 4, pp. 6114-61123.



- [11] TOUMBY, C. (Fall 2008). Reading Feynman into nanotechnology: A text for new science. *Techné*, 3, pp.133-167.
- [12] DREXLER, K. (2004, febrero). Nanotechnology: From Feynman to funding. *Bulletin of science, technology & society*, 24, pp. 21-27.
- [13] TULIP, P. (2004). *Computational Physics: Empirical versus ab initio Methods. En Dielectric and Lattice Dynamical Properties of Molecular Crystals via Density Functional Perturbation Theory: Implementation within a First Principles Code*. Durham, Inglaterra: Durham University.
- [14] LEVINE, I. (2001). *Química cuántica*. Madrid: Pearson educación.
- [15] RAVEENDRAN, P., FU, J. & WALLEN, S. (2002, Noviembre 8). Completely "Green" Synthesis and Stabilization of Metal Nanoparticles. *Journal American Chemical Society*, 125, pp. 13940-13941.
- [16] SCHWERTFEGGER, P. (2011). The Pseudopotential Approximation in Electronic Structure Theory. *ChemPhysChem*, 12, 3143-3155.
- [17] GRIM RE (1962) *Applied Clay Mineralogy. 2nd edn*. McGraw Hill Book Company, New York, USA

  
VoBo Asesora

Dra. Claudia Briones Jurado

  
VoBo Coordinador de la carrera  
Dr. José Núñez González



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO  
SECRETARÍA GENERAL  
DIRECCIÓN GENERAL DE ADMINISTRACIÓN ESCOLAR  
SUBDIRECCIÓN DE SISTEMAS DE REGISTRO ESCOLAR



## Historia Académica (Documento no Oficial)

28 Mayo 2018

NÚMERO DE CUENTA: 415028707		NOMBRE: VEGA GUTIERREZ MIGUEL ANGEL		AÑO DE INGRESO: 2015						
PLANTEL: 703 E.N.E.S. MORELIA (CIENCIAS)										
CARRERA: 133 PLAN DE ESTUDIOS: 1649 - LIC EN CIENCIA DE MATER.SUSTENT.-DESARR.TECN.										
<b>AVANCE DE CRÉDITOS</b>				<b>ASIGNATURAS</b>						
OBLIGATORIOS:	326	de	329	99.08 %	APROBADAS: 49					
OPTATIVOS:	31	de	40	77.50 %	NO APROBADAS: 0					
TOTALES:	357	de	369	96.74 %	TOTAL: 49					
				<b>PROMEDIO 8.80</b>						
CLAVE PLANTEL	CLAVE ASIGNATURA	CREDITOS	NOMBRE DE LA ASIGNATURA	CALIFICACION	TIPO DE EXAMEN	PERIODO	FOLIO ACTA	GRUPO	ORD	EXT
PRIMER SEMESTRE										
703	0103	06	OBL INGLÉS	10	ORD	2015-1	2111345	7811	1	
703	0135	10	OBL FISICA I	6	ORD	2015-1	2111377	7811	1	
703	0136	08	OBL FUNDAMENTOS DE GEOLOGIA	9	ORD	2015-1	2111378	7811	1	
703	0137	06	OBL LABORATORIO INTERDISCIPLINARIO I	9	ORD	2015-1	2111379	7811	1	
703	0138	11	OBL MATEMATICAS I	7	ORD	2015-1	2111380	7811	1	
703	0139	08	OBL QUIMICA GENERAL	9	ORD	2015-1	2111381	7811	1	
SEGUNDO SEMESTRE										
703	0203	06	OBL INGLÉS	10	ORD	2015-2	2252401	7821	1	
703	0235	10	OBL FISICA II	7	ORD	2015-2	2252441	7821	1	
703	0236	04	OBL LABORATORIO INTERDISCIPLINARIO II	9	ORD	2015-2	2252442	7821	1	
703	0237	11	OBL MATEMATICAS II	10	ORD	2015-2	2252443	7821	1	
703	0238	08	OBL QUIMICA INORGANICA	9	ORD	2015-2	2252444	7821	1	
703	0239	08	OBL QUIMICA ORGANICA	9	ORD	2015-2	2252445	7821	1	
703	0240	09	OBL SOCIEDAD, ENERGIA Y AMBIENTE	8	ORD	2015-2	2252446	7821	1	
TERCER SEMESTRE										
703	0303	06	OBL INGLÉS	10	ORD	2016-1	R8107455	783G	1	
703	0335	09	OBL MATEMATICAS III	8	ORD	2016-1	2353957	7831	1	
703	0336	08	OBL CIENCIA DE MATERIALES I	9	ORD	2016-1	2353958	7831	1	
703	0337	04	OBL CIENCIA Y SOCIEDAD	8	ORD	2016-1	2353959	7831	1	
703	0338	09	OBL FISICA III	8	ORD	2016-1	2353960	7831	1	
703	0339	04	OBL INTRODUCCION A LA SUSTENTABILIDAD	9	ORD	2016-1	2353961	7831	1	
703	0340	03	OBL LABORATORIO DE FISICA III	9	ORD	2016-1	2353962	7831	1	
703	0341	07	OBL PROBABILIDAD Y ESTADISTICA	6	ORD	2016-1	2353963	7831	1	
703	0342	10	OBL TECNOLOGIA Y DESARROLLO SUSTENTABLE	9	ORD	2016-1	2353964	7831	1	
CUARTO SEMESTRE										
703	0402	06	OBL INGLÉS	10	ORD	2017-2	2796631	7848	1	
703	0435	04	OBL ALGORIT.COMPUTACIONALES Y PROGRAM.	6	ORD	2016-2	2528348	7841	1	
703	0436	08	OBL CIENCIA DE MATERIALES II	9	ORD	2016-2	2528349	7841	1	
703	0437	06	OBL ECONOMIA Y AMBIENTE	9	ORD	2016-2	2528350	7841	1	
703	0438	06	OBL ECO-EFICIENCIA	10	ORD	2016-2	2528352	7841	1	
703	0439	07	OBL FISICOQUIMICA	6	ORD	2016-2	2528354	7841	1	
703	0440	07	OBL MATEMATICAS IV	8	ORD	2016-2	2528355	7841	1	
703	0441	08	OBL POLITICAS PUBLICAS Y LEGISL. AMBIEN.	10	ORD	2016-2	2528356	7841	1	
QUINTO SEMESTRE										
703	0500	06	OBL INGLÉS	10	ORD	2017-1	2641793	7858	1	
703	0541	09	OBL ESTADO SOLIDO	9	ORD	2017-1	2641860	7851	1	
703	0542	09	OBL ELECTROQUIMICA	9	ORD	2017-1	2641863	7851	1	
703	0543	09	OBL MECANICA CUÁNTICA	8	ORD	2017-1	2641866	7851	1	
703	0544	09	OBL PROPIEDADES ELECTROMAGNET.MATERIAL	8	ORD	2017-1	2641869	7851	1	
703	0545	09	OBL METODOS MATEMATICOS	10	ORD	2018-1	2911356	7851	2	
SEXTO SEMESTRE										
703	0600	06	OBL INGLÉS	10	ORD	2016-2	2528371	786A	1	
703	0642	09	OBL SEMICONDUCT.Y DISPOSIT.ELECTRONIC.	9	ORD	2017-2	2796749	7862	1	
703	0643	07	OBL NANOMATERIALES	9	ORD	2017-2	2796750	7862	1	
703	0646	10	OBL INDICADORES DE IMPACTO AMBIENTAL	10	ORD	2017-2	2796753	7861	1	
703	0647	08	OBL MICROSCOPIA ELECTRON Y ESPECTROSC.	9	ORD	2017-2	2796754	7861	1	
SEPTIMO SEMESTRE										

28/5/2018

## UNAM / DGAE / SIAE ~ Sistema Integral de Administración Escolar

703	0700	06	OBL	INGLES	10	ORD	2018-1	2911378	7878	1	
703	0743	12	OBL	TALLER BASICO INVEST.DESARR.TECNOL.	10	ORD	2018-1	2911427	7871	1	
OPTATIVAS											
703	0951	07	OPT	ESPINTRONICA	10	ORD	2017-2	2796784	7862	1	
703	0954	09	OPT	MÉCANICA ESTADÍSTICA DE LOS MATERIA.	9	ORD	2018-1	2911439	7871	1	
703	0958	09	OPT	SUPERCONDUCTIVIDAD	9	ORD	2017-2	2796785	7862	1	
703	0960	08	OPT	TEMAS SELEC.DE INGENIE.DE MATERIAL	9	ORD	2018-1	2911443	7871	1	
703	3002	00	OPT	PENSAMIENTO AMBIENTAL Y SUSTETABIL.	AC	ORD	2016-1	2354103	7831	1	
703	3003	00	OPT	PERSPECTIVA DE GENERO	AC	ORD	2015-2	2252558	7821	1	

**"El promedio y avance de créditos deben ser validados por el área de Servicios Escolares del plantel mediante constancia, certificado o revisión de estudios."**