



Dr. Álvaro Posada Amarillas

Profesor Investigador

Universidad de Sonora

Departamento de Investigación en Física

Academia



Campus Universitario, Edificio 3 "I" planta baja. Blvd. Luis Encinas J. y Rosales, Col. Centro, Hermosillo, Sonora. C.P. 83000

Teléfono: 259-21-56 Ext. 2500

E-mail: posada@cifus.uson.mx

Publicaciones:

"Empirical-potential global minima and DFT local minima of trimetallic Ag/Au_mPt_n ($l + m + n = 13, 19, 33, 38$) clusters", R. Pacheco-Contreras, J. O. Juárez-Sánchez, M. Dessens-Félix, F. Aguilera-Granja, A. Fortunelli, A. Posada-Amarillas, *Computational Materials Science*, **141**, 30-40, 2018.

"A Theoretical Study on the Geometry and Spectroscopic Properties of Ground-state and Local Minima Isomers of (CuS)_{n=2-6} Clusters" J. C. Luque-Ceballos, A. Posada-Borbón, R. Herrera-Urbina, R. Aceves, J. O. Juárez-Sánchez, A. Posada-Amarillas, *Physica E*, **97**, 1-7, 2018.

"CO₂ adsorption on gas-phase Cu_{4-x}Pt_x ($x=0-4$) clusters: a DFT study", L. E. Gálvez-González, J. O. Juárez-Sánchez, R. Pacheco-Contreras, I. L. Garzón, L. O. Paz-Borbón, A. Posada-Amarillas, *Physical Chemistry Chemical Physics*, **20**, 17071-17080, 2018.

"Theoretical Investigation of the Structures of Unsupported 38-atom CuPt Clusters", J. Guerrero-Jordan, J. L. Cabellos, R. L. Johnston, A. Posada-Amarillas, *European Physical Journal B*, **91**, 123, 2018.

"TDDFT Study of the Optical Spectra of Free and Supported Binary Coinage Metal Hexamers: Effect of Doping and Support", J. C. Luque-Ceballos, L. Sementa, E. Aprà, A. Fortunelli, A. Posada-Amarillas, *Journal of Physical Chemistry C*, **122**, 23143-23152, 2018.

"CeO₂(111) electronic reducibility tuned by ultra-small supported bimetallic Pt-Cu clusters", L. O. Paz-Borbón, F. Buendía, I. L. Garzon, A. Posada-Amarillas, F. Illas, J. Li, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 2019, DOI: 10.1039/C9CP01772K.

Congresos:

XXVII International Materials Research Congress, 19-24 de agosto de 2018, Cancún, México. "Study of the optical absorption for monometallic noble metal clusters supported on MgO using TD-DFT".

I^{er} Coloquio de Simulaciones Computacionales en Ciencias, 16-17 de agosto de 2018, Ensenada, B.C. "Simulation of CO₂ Adsorption on Tetramer Cu-Pt Clusters".

International Meeting on Nanoalloys, 22-25 de mayo de 2018, Orléans, Francia. "CO₂ Adsorption on Gas-Phase 4-atom Cu-Pt Clusters: A DFT Study".

Tesis dirigidas:

"Estudio de estructuras de cúmulos de Cu-Ni mediante el método Basin-Hopping", Carlos Emiliano Buelna García, Licenciatura en Física, 15 de septiembre de 2017.

"Síntesis de nanopartículas metálicas con extracto de té verde: caracterización física y biológica", Mario Alberto García Soqui, Licenciatura en Químico Biólogo Clínico, 16 de junio de 2016.

"Síntesis y caracterización de nanopartículas de sulfuro de cobre obtenidas por el método poliol", Jesús Humberto Coronado López, Doctorado en Ciencia de Materiales, 12 de noviembre de 2015.

"Estudios quimicuánticos de nanopartículas semiconductoras en fase gas", José Octavio Juárez Sánchez, Doctorado en Ciencia de Materiales, 13 de noviembre de 2015.

"Estudio teórico de estabilidad estructural en nanopartículas bimetalicas", Maribel Dessens Félix, Doctorado en Ciencia de Materiales, noviembre de 2014.

LGAC (Líneas de Generación y aplicación del conocimiento):

Física computacional

- LGAC30: Estudio de sistemas nanométricos
- LGAC31: Estudio de sistemas cristalinos
- LGAC32: Simulaciones numéricas del colapso gravitacional y la formación de estrellas.
- LGAC33: Desarrollo de métodos computacionales para aplicaciones en ciencia e ingeniería.

Breve síntesis del área de física que investiga:

1.- Estudio de las propiedades estructurales, ópticas y electrónicas de agregados atómicos 0 dimensionales (cúmulos atómicos) compuestos por átomos de metales nobles y de transición mediante métodos teóricos y experimentales. Particularmente, se busca entender las propiedades químicas asociadas con la reactividad de este tipo de sistemas para aplicaciones nanotecnológicas en el área de catálisis. Se utilizan diversas técnicas de simulación computacional para el estudio de las propiedades estructurales empleando potenciales semiempíricos, así como métodos de primeros principios como apoyo para entender el origen de dichas propiedades desde un punto de vista atomístico.

2.- Estudio de sistemas cristalinos de 2 y 3 dimensiones mediante esquemas teóricos de primeros principios para el cálculo de sus propiedades electrónicas. Se busca caracterizar el efecto de la interacción de sistemas cristalinos 2D con átomos, individuales o aglomerados, sobre sus propiedades electrónicas. Para ello se calculan densidades de estados y estructura de bandas electrónicas, haciendo consideraciones físicas relevantes para simular la interacción real de los átomos de los cristales con los sistemas atómicos en consideración. Particularmente, se explora el comportamiento de los electrones que participan en tales interacciones para explicar los cambios inducidos mutuamente. En sistemas cristalinos 3D, se explora la posibilidad de determinar teóricamente la existencia de materiales superduros.