



ESTUDIO TEÓRICO DE LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA Y REACTIVIDAD DE CÚMULOS DE COBALTO, $\text{Co}_n \text{m}(\text{NO})$ y $\text{Co}_n \text{m}(\text{N}_2\text{O})$ ($n=7-9$, $m=0-1$, $q=0,1$)

José Guadalupe Facio Muñoz¹, Francisco José Tenorio Rangel¹ y Jaime Gustavo Rodríguez Zavala¹

¹ Centro Universitario de los Lagos, Universidad de Guadalajara. aleman.iak@hotmail.com

Los cúmulos metálicos se caracterizan por una relativa dependencia entre las propiedades físicas, químicas, electrónicas y magnéticas con respecto al tamaño y la geometría del sistema [1]. Los cúmulos de cobalto poseen características y propiedades con alto poder catalítico. Además, muestran varias propiedades magnéticas y electrónicas que dependen de su tamaño y geometría [2] [3] [4]. En este trabajo se estudiaron cúmulos de cobalto puros y mezclados con óxido nítrico y óxido nitroso [$\text{Co}_n \text{q} \text{m}(\text{NO})$ y $\text{Co}_n \text{q} \text{m}(\text{N}_2\text{O})$] ($n=7-9$, $m=0-1$, $q=0,1$) bajo la estructura de teoría de funcionales de la densidad [5]. La búsqueda de mínimos sobre la superficie de energía potencial y los índices de reactividad se realizaron utilizando GAUSSIAN 09 [6] a través de la aproximación de gradiente generalizado BPW91 [7] [8] en combinación con la base 6-311G [9].

El presente trabajo muestra los resultados sobre índices de reactividad global como el potencial de ionización, la afinidad electrónica y el potencial químico [5]. Además, se ha encontrado un resultado importante en las funciones de Fukui [5], donde es posible la predicción de la reactividad local en esos sistemas. Las geometrías que se encontraron para los cúmulos de 7, 8 y 9 átomos de cobalto, están en buen acuerdo con la literatura [10]. Todos los sistemas muestran una quimisorción disociativa de NO y N_2O sin fragmentación del grupo.