ESTUDIO TEÓRICO DE LA ESTRUCTURA ELECTRÓNICA Y REACTIVIDAD DE CÚMULOS DE COBALTO CO16Q(O)N (N=0-6 Y Q=0-1)

José Guadalupe Facio Muñoz[1], Francisco José Tenorio Rangel[1] y Jaime Gustavo Rodríguez Zavala[1]

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

El estudio de cúmulos de metales, entre ellos los metales de transición, se encuentra en constante crecimiento debido a las diversas aplicaciones que muestran estos sistemas, los cuales son caracterizados por una relativa dependencia entre las propiedades físicas, químicas, electrónicas y magnéticas respecto al tamaño y la geometría[1]. Dichas propiedades son sustancialmente diferentes tanto a las del átomo como a las del sólido o *bulk* [2] y, por lo tanto, tienen características únicas e inesperadas para cada tamaño de cúmulo, incluso aunque se trate de elementos vecinos en la tabla periódica. En este sentido, tanto la estructura geométrica como la electrónica de estas partículas se ven afectadas significativamente por la adición o remoción de un solo átomo [3]. Ejemplo de este tipo de partículas, se tiene a los cúmulos de cobalto los cuales son sistemas que poseen propiedades y características que le permiten el rompimiento de moléculas sobre su superficie. En este trabajo, se realiza un estudio teórico acerca de la estructura electrónica y reactividad de cúmulos de 16 átomos de cobalto tanto de naturaleza neutra como catiónica donde se analiza la quimisorción de átomos de oxígeno, $Co16q(O)n$(n=0-6 y q=0-1), bajo el formalismo de la Teoría de Funcionales de la Densidad [4]. Se muestran los resultados acerca de los índices de reactividad global como potencial de ionización, afinidad electrónica y potencial químico de los sistemas neutros. Por otro lado, también se realiza el cálculo de las funciones de Fukui [4] como índice de reactividad local, de donde se obtienen resultados que evidencian los sitios reactivos para la quimisorción de átomos de oxígeno sin que ocurra fragmentación del sistema, lo cual concuerda con datos reportados en la literatura [5] siendo evidente que se favorece una quimisorción disociativa de moléculas de óxido nítrico sobre este sistema.