



Estudio teórico de la estructura electrónica y reactividad de cúmulos de cobalto $Co_{16q}(O)_n$ ($n=7-8$ y $q=0-1$)

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

La simulación computacional además de constituir un complemento en la investigación experimental, representa un instrumento fundamental con capacidad predictiva de propiedades y de reactividad en diversos sistemas. Ejemplo de ello se tiene a los cúmulos de metales de transición, los cuales muestran diversas aplicaciones en diferentes campos de estudio debido a que son sistemas que presentan cierta dependencia entre las propiedades físicas, químicas, electrónicas y magnéticas respecto al tamaño y la geometría [1]; mostrando características únicas para cada tamaño de cúmulo, las cuales son sustancialmente diferentes tanto a las del átomo como a las del sólido o *bulk* [2], sugiriendo que tanto la estructura geométrica como la electrónica de esas partículas se ven afectadas debido a la adición o remoción de un solo átomo [3]. En este sentido, los cúmulos de cobalto poseen propiedades y características que le permiten el rompimiento de moléculas sobre su superficie, tales como el NO y el N_2O . De esta manera, mediante un estudio teórico acerca de la estructura electrónica y reactividad de cúmulos de 16 átomos de cobalto de naturaleza neutra y catiónica, se analiza la quimisorción de átomos de oxígeno, $Co_{16q}(O)_n$ ($n=7-8$ y $q=0-1$), lo cual concuerda con datos reportados en la literatura [4]. Dicho estudio se realizó bajo el formalismo de la TFB [5] donde las estructuras iniciales para la optimización de las geometrías, fueron tomadas de las trayectorias desarrolladas mediante la metodología BOMD [6]. Se muestran los resultados acerca de los índices de reactividad global y local, donde estos últimos corresponden al cálculo de las funciones de Fukui [5] que evidencian los sitios reactivos para la quimisorción de átomos de oxígeno sin que ocurra fragmentación del sistema, lo cual indica que se lleva a cabo el rompimiento de moléculas de NO sobre la estructura del cúmulo Co_{16q} [4].