



Estudio de la estructura electrónica y reactividad de cúmulos de 4 átomos de cobalto neutros y cationes mezclados con óxido nítrico y óxido nitroso

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 son sistemas finitos de átomos o moléculas con número de componentes entre dos y miles de ellos. Se consideran una especie intermedia entre el átomo y el sólido debido a que sus propiedades electrónicas y estructurales no corresponden con las de ninguno de ellos, comportándose en función de su tamaño, además de que evolucionan hacia las propiedades del sólido o del *bulk*. Los cúmulos metálicos han sido estudiados tanto teórica como experimentalmente, analizando el comportamiento y evolución de las geometrías así como la reactividad de las especies involucradas.

Este trabajo se centra en un estudio teórico por funcionales de la densidad; utilizando *BPW91* en combinación con la base numérica *6-311G* para investigar la estructura electrónica y reactividad tanto global como local de cúmulos de cobalto neutros y cationes, Co_n^q ($q=0,1$ y $n=4$), interaccionando con óxido nítrico (NO) y nitroso (N_2O).

Se obtienen estructuras que corresponden a mínimos sobre la superficie de energía potencial de los sistemas Co_4 , Co_4^+ , Co_4NO , Co_4NO^+ , $\text{Co}_4\text{N}_2\text{O}$ y $\text{Co}_4\text{N}_2\text{O}^+$. Se compara satisfactoriamente la estructura del cúmulo de cobalto puro obtenida mediante este nivel de teoría con otra antes reportada. Los resultados sugieren que se realiza una quimisorción disociativa, del NO y del N_2O , misma que se confirma mediante el cálculo de las energías de formación de los sistemas respectivos. La quimisorción molecular, la cual se sugiere como no estable, ocurre preferentemente por la interacción del átomo de nitrógeno con el cúmulo de cobalto, en lugar del oxígeno. Para todos los sistemas neutros se analizan los índices de reactividad global así como el poder descriptivo de las funciones de Fukui las cuales muestran zonas reactivas donde sería posible la interacción con más moléculas de NO y N_2O .