



ESTUDIO POR QUÍMICA COMPUTACIONAL DE LA ESTRUCTURA Y REACTIVIDAD DE CÚMULOS DE COBALTO PUROS Y MEZCLADOS CON NO

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

El estudio tanto teórico como experimental acerca de la estructura y el comportamiento electrónico de los cúmulos metálicos se ha incrementado debido a las aplicaciones en catálisis. Los cúmulos definidos como 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.

En este trabajo se presentan los resultados de un estudio teórico por funcionales de la densidad (TFD)¹ utilizando el funcional BPW912,3 y el conjunto de base 6-311G para investigar cúmulos de cobalto, Co_n ($n=7-9, q=0,1$), puros e interaccionando con óxido nítrico, analizando el comportamiento de cúmulos dependientes del tamaño y la reactividad como agentes disociativos. Se calcularon los índices de reactividad global tales como el potencial de ionización, la afinidad electrónica y el potencial químico, además de las funciones de Fukui² como descriptor local de los sistemas neutros, además de que se compararon satisfactoriamente las estructuras de los cúmulos de cobalto puros con otras antes reportadas⁴.

[1] Parr Robert G. Yang Weitao, Density Functional Theory of Atoms an Molecules, Oxford University Press, New York, 1989.

[2] Becke A. D, J. Phys. Rev. A 1988, 38, 3098.

[3] Perdew J. P., Wang Y., Phys. Rev. B. 1991, 43, 8911.

[4] Zhan L., Y. Chen J. Z., Luis W. K., Lai S. K., J. Chem. Phys. 2005 122, 244707.