



## MODELACIÓN TEÓRICA DE LA CAPACIDAD DE ALMACENAMIENTO DE OXÍGENO DEL $\text{CeO}_2$

José Juan Peña Leal<sup>1</sup>, Rafael A. Barrio Paredes<sup>2,+</sup>, Gabriela A. Díaz Guerrero<sup>2</sup>,

<sup>1</sup>Instituto de Ciencias Nucleares, CCC, UNAM, Dpto. Física de Plasmas y de Radiaciones; México. <sup>2+</sup>Instituto de Física, Dpto. Físico Química Teórica, UNAM; México.

e-mail: [yaravi@ciencias.unam.mx](mailto:yaravi@ciencias.unam.mx)

El cerio es un material que tiene valencia mixta, propiedad que tienen los materiales de transición, son dos estados estables de oxidación +3 y +4, como lo describe Tiziano<sup>1</sup> y la relativa facilidad de cambiar entre estos dos estados es esencial para su destacada capacidad catalítica. Este rápido cambio en el estado de oxidación está asociado con su capacidad para almacenar y liberar oxígeno, (OSC), descrita previamente por Mullins<sup>2</sup>. La movilidad de los iones de oxígeno en los materiales de óxido de cerio es otro factor esencial para la catálisis y efectos electroquímicos, esta propiedad está estrechamente relacionada con defectos estructurales presentes en materiales. Se presenta un modelo teórico basado en el modelo de la matriz estocástica, en el cual la idea principal es considerar que el sólido se forma por la aglomeración de entidades fundamentales estables, las cuales pueden ser átomos o moléculas, la parte interna no es relevante para el proceso de absorción de o emisión de oxígeno, debido a que todos los enlaces químicos que ya están saturados no se pueden destruir en promedio y no es posible por tanto agregar nuevas unidades. Sin embargo en el borde de un cúmulo promedio, se encuentra un número limitado de configuraciones, a los cuales llamamos sitios, cuyos enlaces químicos no están totalmente saturados, y es posible agregar en cada uno de ellos alguna de las unidades presentes en el gas incidente. Por lo tanto, para describir el proceso de adsorción o emisión de iones de oxígeno, lo importante es describir el borde estadísticamente y su evolución en cada etapa de formación de vacancias de oxígeno. Este modelo utiliza dos matrices, una matriz de interacción del sistema (estocástica), descrita previamente por Kerner<sup>3</sup> y otra matriz acoplada (spinor), que utiliza la interacción del sistema con el ambiente externo. Es decir, a un cristal de  $\text{CeO}_2$  con orientación (100) hacemos que interactúe con un flujo de CO, e.i.  $\text{CO} + \text{O}_2^- \leftrightarrow \text{CO}_2 + 2e^-$ . Este modelo nos permite obtener la cantidad de oxígeno absorbido, cuando el contenido de oxígeno del CO disminuye y este se convierte en  $\text{CO}_2$ , y en consecuencia podemos predecir la capacidad de almacenamiento de oxígeno de este sistema.

1.-Tiziano Montini, Michele Melchionna, Matteo Monai, and Paolo Fornasiero. Fundamentals and Catalytic Applications of CeO<sub>2</sub>-Based Materials.

2.-David R. Mullins, The surface chemistry of cerium oxide. Surface Science Reports 70 (2015) 42–85.

3.-R. Kerner, Mathematical Models of Glass Formation, Glass Physics and Chemistry; Vol. 26, No. 4, 2000, pp. 313-324