



## Analisis Teórico de la oxidación de CO por FeO incrustado en una vacancia de grafeno via Langmuir-Hinshelwood.

Ulises G. Reyes-Leaño<sup>1</sup>, J. Ulises Reveles-Ramirez<sup>2</sup>, Zeferino Gómez-Sandoval<sup>1</sup>.

<sup>1</sup>Facultad de Ciencias Químicas, Universidad de Colima, Km 9 Carretera Colima-Coquimatlán, Coquimatlán, Colima C.P. 28400, México.

<sup>2</sup>Department Of Physics, Virginia Commonwealth University, 821 W Franklin St, Richmond, VA 23284, USA.

ulises\_reyes@uacol.mx

Los catalizadores actuales que oxidan al CO en CO<sub>2</sub>, necesitan una gran cantidad de energía para superar la barrera de activación y es por eso que no trabajan eficientemente a temperatura ambiente.

Se tienen antecedentes de catálisis de CO utilizando cúmulos de hierro y grafeno por separado, ambos favorecidos cinéticamente<sup>1 2</sup>. Por este motivo se decidió analizar *in silico*, las rutas energéticas de diferentes cúmulos de óxidos de hierro incrustados en una vacancia de grafeno.

Las funciones de onda para los cúmulos se construyeron a partir de una combinación lineal de orbitales tipo gaussianas centradas en las posiciones atómicas del cúmulo. Se optimizaron las geometrías de FeO, FeO<sub>2</sub> y FeO<sub>3</sub> considerando distintas multiplicidades de espín. Se emplearon las funciones de base DZVP(O)-RECP16|SD(Fe), DZVP(O)-Wachters-F(Fe) y DZVP(Fe, O), con el funcional no local de intercambio y correlación propuesto por Perdew-Burke-Erzerhoff (PBE)<sup>c</sup>. Para validar la metodología propuesta, se calcularon las energías de ionización verticales de los cúmulos aniónicos <sup>4</sup>FeO<sup>-</sup>, <sup>4</sup>FeO<sub>2</sub><sup>-</sup> y <sup>4</sup>FeO<sub>3</sub><sup>-</sup>, los valores obtenidos se compararon con los datos experimentales reportados<sup>3</sup>.

Se propuso una ruta catalítica de coadsorción de CO y O<sub>2</sub> sobre un átomo de hierro incrustado en grafeno, por la ruta catalítica Langmuir-Hinshelwood; se analizaron las barreras de activación, estados de transición e intermediarios.

### Bibliografía

- (1) Zamora, A. Y.; Reveles, J. U.; Mejia-Olvera, R.; Baruah, T.; Zope, R. R. *Chem. Phys. Lett.* **2014**, *612*, 117–123.
- (2) Gan, Y.; Sun, L.; Banhart, F. *Small* **2008**, *4* (5), 587–591.
- (3) Wachters, A. J. H. *J. Chem. Phys.* **1970**, *52* (3), 1033.