



ESTRUCTURAS, FRECUENCIAS VIBRACIONALES Y PROPIEDADES ENERGÉTICAS DE CÚMULOS DE $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_n$ ($n = 1-4$) IÓNICOS.

Roberto Mejía-Olvera^{1,2}, Pablo Francisco Cazarez-Cano², Sandy María Pacheco-Ortín^{1,2}

¹Departamento de Ciencias Química, FESC-UNAM, Av. Primero de Mayo, s/n; México.

² Universidad Politécnica de Cuautitlán Izcalli, Ex Hacienda de Santa María Tepojaco, Cuautitlán Izcalli, México. e-mail: rmejia_cinvestav@hotmail.com

En este trabajo se presentan las estructuras de mínima energía de nanocúmulos de óxido de hierro $(\text{Fe}_3\text{O}_4)_n$ con $n = 1-4$ iónicos. La búsqueda de los mínimos se realizó por medio del algoritmo genético de gradiente embebido (GEGA, por sus siglas en inglés) y por análisis de una trayectoria de dinámica molecular tipo Born-Oppenheimer^[1] (BOMD, por sus siglas en inglés). Posteriormente se seleccionaron las estructuras obtenidas por ambos métodos para realizarle tanto cálculos de optimización local y análisis de frecuencias vibracionales con el objeto de conocer cuáles estructuras son realmente mínimos en la superficie de energía potencial (PES, por sus siglas en inglés). Estos cálculos se realizaron con el funcional de intercambio y correlación PBE^[2], el conjunto de bases DZVP y las bases auxiliares GEN-A2^[3]. Además de las estructuras, las siguientes propiedades energéticas son presentadas: potenciales de ionización, afinidades electrónicas y energías de polimerización. Todos los cálculos se realizaron en el marco de la teoría de funcionales de la densidad (DFT, por sus siglas en inglés) incluida en el código deMon2k.^[4]

El objetivo de este trabajo es encontrar las estructuras de mínima energía de los cúmulos de Fe_3O_4 iónicos y posteriormente observar si se lleva a cabo la oxidación del CO a CO_2 sobre superficies de $\text{MgO}(100)$, como se realizó en una trabajo previo^[5], donde se utilizaron cúmulos de óxido de hierro más pequeños tales como: FeO , FeO_2 , FeO_3 , FeO_4 , Fe_2O , Fe_2O_2 , Fe_2O_3 , Fe_2O_4 , neutro y iónicos.

[1] M. Born, J. R. Oppenheimer, *Ann. Phys.* **84**, 457 (1927)

[2] J. P. Perdew, K. Burke, M. Ernzerhof, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 3865 (1996)

[3] P. Calaminici, F. Janetzko, A. M. Köster, R. Mejía-Olvera, B. Zuniga-Gutierrez, *J. Chem. Phys.* **126**, 044108 (2007)

[4] A. M. Köster, G. Geudtner, P. Calaminici, M. E. Casida, V. D. Dominguez, R. Flores-Moreno, G. U. Gamboa, A. Goursot, T. Heine, A. Ipatov, et al., deMon2k, Version 3, The deMon developers, Cinvestav, Mexico City, 2016.

[5] A. Y. Zamora, J. U. Reveles, R. Mejía-Olvera, T. Baruah, R. R. Zope, *J. Chem. Phys. Lett.* **612**, 117-123 (2014).