



ESTUDIO TEÓRICO Y COMPUTACIONAL DE NANOALEACIONES BIMETÁLICAS TIPO CORE-SHELL $X_{22}Y_4$ (X= Cu, Ag; Y= Co, Ni, Pt, Pd, Rh, Ru)

¹Sonia Betancourt Alvarez y ¹Gregorio Guzmán Ramírez.

¹Departamento de ingenierías, Centro universitario de Tonalá, Universidad de Guadalajara.
Av. periférico no.555 CP: 48525, Tonalá Jal. México
sunny_2701@hotmail.com

Una de las principales razones del incremento en el interés científico en nanoaleaciones binarias es que proporcionan una mejora en las propiedades físicoquímicas, generando nuevos materiales para aplicaciones en catálisis [1,2]. En nuestra investigación lo que se busca es poder simular a través de la química computacional, nuevas estructuras de aleaciones tipo core-shell que puedan ser viables para poder sustituir a los catalizadores que se usan actualmente obteniendo así un mayor rendimiento. Se han construido cúmulos de 26 átomos, $X_{22}Y_4$, donde X está conformado por los metales Cu y Ag que a su vez conforman la capa (shell) y Y representa los elementos Co, Ni, Pd, Pt, Ru y Rh que hacen las veces del núcleo (core). Estas nanoaleaciones fueron construidas con una geometría poliicosáedrica y donde el núcleo mantiene una forma tetraédrica. Todas las estructuras han sido optimizadas bajo la teoría de funcionales de la densidad (DFT) [3], a un nivel de teoría PBE/LANL2DZ. Además se ha realizado un estudio con diferentes multiplicidades de espín y sin restricción de simetría para asegurar las estructuras más estables. En este trabajo se analizan algunas propiedades electrónicas como energías de amarre, energías de exceso, parámetro de orden químico [4], potenciales de ionización y afinidades electrónicas; propiedades estructurales como deformación de la geometría y distancias promedio a primeros vecinos. Además se discuten algunos índices de reactividad como el potencial químico, la dureza global, la electrofilicidad y los índices de Fukui.

Referencias:

- [1] <http://tesis.uson.mx/digital/tesis/docs/20581/Capitulo1.pdf>
- [2] Dora J. Borbon-Gonzalez, Alessandro Fortunelli, Giovanni Barcaro, Luca Sementa, Roy L. Johnston, and Alvaro Posada-Amarillas. J. Phys. Chem. A 2013,117, 14261- 14266.
- [3] R.G. Parr, W. Yang, Density-Functional Theory of Atoms and Molecules (Oxford University Press, 1994)
- [4] F. Ducastelle, Order and Phase Stability in Alloys (North Holland, Amsterdam, 1991)