

BENEMÉRITA UNIVERSIDAD AUTÓNOMA DE PUEBLA

INSTITUTO DE FÍSICA

“Ing. Luis Rivera Terrazas”



SEMINARIO SEMANAL

“Jesús Reyes Corona”

“Modelado computacional de materiales catalíticos para remediación del aire”

Dra. Ana Elizabeth Torres

Investigadora Asociada "C"

Instituto de Ciencias Aplicadas y Tecnología (ICAT), UNAM-México

Se presentan resultados de estudios computacionales sobre la estabilidad y propiedades electrónicas de nanoestructuras bimetálicas (Au, Pd, Pt, Rh y Au-M, M=Ru, Cu) soportadas en TiO_2 , y su actividad catalítica en la oxidación de CO o propano a baja temperatura. Se analizó el efecto de la geometría, morfología y composición relativa en la estabilidad energética. Se identificó un intermediario reactivo tipo peréster en la ruta de reacción del cúmulo de oro, explicando su alta actividad en la oxidación de CO. Cálculos a primeros principios en estructuras $\text{M}_{13}/\text{TiO}_2$ mostraron una transferencia de carga hacia Au desde el soporte defectuoso, que correlaciona con su alta actividad catalítica, mientras que Rh favoreció la activación del oxígeno en la interfase metal-soporte. La co-adsorción de CO indujo transferencia de carga del metal, promoviendo la formación de especies M^+-CO para sistemas con alta actividad catalítica de Au y Rh. En cúmulos Au-Ru, Au-Cu, la oxidación de CO inició con adsorción asociativa de oxígeno. El análisis de cargas mostró que Cu sostiene la activación de O_2 y la oxidación de CO a través de su oxidación, funcionando como un reservorio de carga. Para la oxidación de propano, cálculos en cúmulos de Pd, Pt y Pt-Pd/ TiO_2 revelaron una correlación entre la acidez de Lewis y la actividad catalítica, sugiriéndose como un descriptor de reactividad química. Este estudio proporciona una mayor comprensión sobre el origen del efecto sinérgico de estos metales en la actividad catalítica para la oxidación de CO y propano, y provee información sobre intermediarios reactivos como guía para estudiar estos sistemas en fase heterogénea.

Auditorio del Instituto
Viernes 28 de junio de 2024
13:00 hrs