



## ESTUDIO TEORICO Y COMPUTACIONAL DE LAS PROPIEDADES DE LOS SISTEMAS Pt<sub>5</sub> Y Pt<sub>4</sub>Mo FRENTE A LA ADSORCIÓN DE CO

Samanta Magalí Carrión<sup>(1,2)\*</sup>, María Beatriz López<sup>(2)</sup>, Reinaldo Pis Diez<sup>(3)</sup>

<sup>1</sup>CITCa, CONICET, Universidad Nacional de Catamarca, Argentina.

<sup>2</sup>CIFTA, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad Nacional de Catamarca, Argentina.

<sup>3</sup>CEQUINOR, CONICET, Departamento de Química, Facultad de Ciencias Exactas, Universidad Nacional de La Plata, Argentina.

\*Correo electrónico: [carrionmagui@hotmail.com](mailto:carrionmagui@hotmail.com)

### RESUMEN

*Basados en la Teoría del Funcional de la Densidad, se realizó un estudio teórico y computacional de las propiedades estructurales, energéticas y de reactividad química de los sistemas platino puro (Pt<sub>5</sub>) y platino dopado con molibdeno (Pt<sub>4</sub>Mo) frente a la adsorción de monóxido de carbono (CO).*

*Los cálculos fueron realizados sin imponer restricciones de simetría, se utilizó el funcional de intercambio de Becke y el funcional de correlación de Lee, Yang y Parr (B3LYP) y funciones base LANL2TZ(f) (que incluye funciones difusas) para el Pt y Mo y funciones 6-31G\* para el C y O. Todos los cálculos se llevaron a cabo con el programa Gaussian09.*

*Para confirmar que la geometría optimizada corresponde a un mínimo local se calcularon frecuencias vibracionales.*

*Se estudiaron todos los sitios disponibles (en total 6 casos) para la interacción de la molécula CO con el sistema Pt<sub>4</sub>Mo, probándose diferentes multiplicidades para cada uno de ellos hasta encontrar la que minimiza la energía.*

*Nuestros resultados permiten concluir que todos los sistemas estudiados presentan frecuencias reales y que la molécula CO se adsorbe preferentemente en sitios monocoordinados y bicoordinados.*

### ABSTRACT

*Based on Density functional theory, a theoretical and computational study of structural, energetic properties and chemical reactivity of pure platinum (Pt<sub>5</sub>) systems and platinum doped molybdenum (Pt<sub>4</sub>Mo) was made against the adsorption of carbon monoxide (CO).*

*The calculations were made without restrictions of symmetry, functional exchange Becke and functional correlation Lee, Yang, and Parr (B3LYP) and basis functions LANL2TZ (f) was used (including diffuse functions) for Pt and Mo and 6-31G \* functions for C and O. All calculations were performed with the Gaussian09 program.*

*To confirm that the optimized geometry corresponds to a local minimum, vibrational frequencies were calculated.*

*All available sites (total 6 cases) for the interaction of the CO molecule with the Pt<sub>4</sub>Mo system, trying on different multiplicities for each of them to find the one that minimizes energy were studied.*

*Our results allow us to conclude that all systems studied show actual frequencies and that the CO molecule is preferentially adsorbed in both monocoordinated and bicoordinated sites.*

**TÓPICO DEL CONGRESO O SIMPOSIO:** T18

**PRESENTACIÓN (ORAL O PÓSTER):** P (Póster)