

TITULO: Cálculo de propiedades de pequeñas moléculas sobre catalizadores metálicos modificados.

COORDINADOR: JOSE MANUEL ORTS MATEO

Resumen:

En la actual sociedad industrial, los procesos catalizados heterogéneamente juegan un importante papel en la industria química. El desarrollo de métodos teóricos basados en la Teoría del Funcional de la Densidad, de mucho menor coste computacional que los métodos ab initio, junto con la disponibilidad de una creciente capacidad de cálculo a costes cada vez menores ha permitido el estudio teórico de catalizadores heterogéneos y electrocatalizadores. Esto permite la obtención de información sobre una serie de propiedades fisicoquímicas cuya obtención experimental no es posible, o es problemática. En la actualidad, las grandes compañías químicas deciden, a partir de esta información, cuál es el grado de actividad esperado de los catalizadores, lo que permite, a partir de una serie de cálculos teóricos, realizar una selección previa de los sistemas que puedan tener interés experimental.

Objetivos concretos:

- Aprendizaje del uso de programas de cálculo teórico basados en la Teoría del Funcional de la Densidad.
- Aprendizaje del uso de programas para la visualización y análisis de propiedades moleculares.
- Aprender a obtener información microscópica sobre propiedades de catalizadores metálicos modificados a partir de cálculos teóricos. En concreto se estudiará la adsorción de modificadores sencillos (adátomos) sobre los planos cristalográficos de base de metales nobles.
- Aplicación a la obtención de propiedades de especies adsorbidas: energías de adsorción y reacción, geometrías de adsorción, barreras de difusión superficial, frecuencias vibracionales,

Metodología a emplear:

El enfoque de la asignatura es esencialmente práctico. Se aplicará la Teoría del Funcional de la Densidad a la realización de cálculos con condiciones de contorno periódicas, que son el mejor método para la descripción de sólidos extendidos (en particular metales), usando bases de ondas planas, utilizando el paquete de cálculo Vienna Ab-Initio Simulation Package (VASP).

Se analizarán los resultados experimentales utilizando software específico para la visualización de propiedades: geometría, vibraciones, densidad electrónica, densidad de estados.

Relación con asignaturas cursadas y/o itinerario relacionado:

Se aplicarán algunos de los conceptos desarrollados en las asignaturas del Grado en Química:

Química Cuántica y Espectroscopía

Cinética Química

Química Física Avanzada

Química Computacional (Optativa)

Bibliografía o fuentes de información:

- D.S. Sholl, J.A. Steckel. "Density Functional Theory. A Practical Introduction". J. Wiley and Sons, 2009.

- G. Ertl. "Reactions at solid surfaces". J. Wiley and Sons, 2009.

- J.K. Norskov, F. Studt, F. Abild-Pedersen, T. Bligaard. "Fundamental Concepts in Heterogeneous Catalysis". J. Wiley and Sons, 2014.