

Spanish versión:

El estudio de nanopartículas de metales de transición ha despertado gran interés en una amplia gama de aplicaciones, incluido el desarrollo de nuevos nano catalizadores para celdas de combustible. En las últimas décadas, varios grupos de investigadores se han dedicado a estudiar las propiedades de varios tipos de estas nanopartículas, tanto en el ámbito teórico como desde el punto de vista experimental. Las simulaciones computacionales ofrecen una herramienta eficaz para estudiar las estructuras de estos sistemas complejos a nivel atómico y proporcionan información difícil de obtener en experimentos. En nuestro grupo de investigación, en los últimos años nos hemos centrado en el estudio de las propiedades estructurales de sistemas complejos formados por más de un elemento de metal de transición. Los datos obtenidos teóricamente se han comparado con datos experimentales y la concordancia ha sido muy satisfactoria. En este proyecto de investigación de estancia de verano de 2024 se propone realizar un análisis teórico de la reactividad química de nanopartículas bimetalicas formadas por átomos de Pt y Cu con cálculos basados en la teoría de funcionales de densidad auxiliar, tal y como está implementada en el código Mon2k. el cual se desarrolla en el grupo de Química Teórica del Cinvestav.

English version:

The study of transition metal nanoparticles has attracted great interest in a wide range of applications, including the development of new nano catalysts for fuel cells. In recent decades, several groups of researchers have dedicated themselves to studying the properties of various types of these nanoparticles, both in the theoretical field and from an experimental point of view. Computational simulations offer an effective tool to study the structures of these complex systems at an atomistic level and provide information that is difficult to obtain in experiments. In our research group, in recent years we have focused on the study of structural properties of several complex systems made up of more than one transition metal element. The theoretically obtained data have been compared with experimental data and the agreement has been very satisfactory. In this 2024 summer stay research project, it is proposed to carry out a theoretical investigation of the chemical reactivity of bimetallic nanoparticles made up of Pt and Cu atoms with calculations based on the auxiliary density functional theory, as it is implemented in the Mon2k code. which is developed in the Theoretical Chemistry group of Cinvestav.