



## ESTUDIO COMPUTACIONAL DE LA ADSORCIÓN DE CO SOBRE FE (1 0 0) EN LA REACCIÓN DE FISCHER-TROPSCH

S. Amaya-Roncancio\*, D. Linares, K.Sapag

Departamento de Física, INFAP-CONICET, Universidad Nacional de San Luis, ARGENTINA.

\*[samaya@unsl.edu.ar](mailto:samaya@unsl.edu.ar)

### Resumen

*Se investiga dentro del marco de la teoría del funcional de la densidad (DFT), la adsorción y disociación de CO y su reacción con H<sub>2</sub> para la formación de especies CH<sub>n</sub> (CH, CH<sub>2</sub>, CH<sub>3</sub>, CH<sub>4</sub>), como también la formación de productos secundarios CO<sub>2</sub> y H<sub>2</sub>O en la reacción de Fischer-Tropsch (FT) sobre Fe (1 0 0). Se encuentran las energías de transición de las reacciones que forman las especies CH<sub>n</sub> y sus productos secundarios, además de determinar cuáles son los sitios activos de adsorción y de reacción de cada especie sobre la superficie del catalizador. Se presenta un perfil del camino de reacción energéticamente más adecuado para generar la metanación del CO sobre Fe (1 0 0). Por último se presentan los caminos de reacción de la formación de todos los productos involucrados desde sus precursores hasta su resultado. Se concluye que la energía de formación de cadenas CH<sub>n</sub> disminuye a medida que aumenta el número de hidrogenos ligados al carbono. Además, la mayor barrera de energía involucrada en el proceso se presenta en la generación del primer enlace C-H. A partir del análisis de los pasos elementales de la reacción, más concretamente, iniciación, crecimiento de especies CH<sub>n</sub> y terminación, se puede entender si la orientación cristalina utilizada y los caminos de reacción propuestos en este trabajo se ajustan a los resultados obtenidos en la reacción FT.*

**Palabras clave:** DFT, Catálisis, Fischer-Tropsch, Estados de Transición

### Referencias:

- (1) General Rules for Predicting Where a Catalytic Reaction, Zhi-Pan Liu and P. Hu\*, JACS Published on Web 01/22/2003.
- (2) CO dissociation and O removal on Co(0 0 1): a density functional theory study Xue-Qing Gong a, R. Raval b, P. Hu a, Surface Science 562 (2004) 247–25.
- (3) Energetics of methane dissociative adsorption on Rh{111} from DFT calculations), Bouke S. Bunnik \*, Gert Jan Kramer, Journal of Catalysis 242 (20 06) 309–318.