



## Identificación de los sitios superficiales de menor energía de adsorción para el carbono en las superficies (0 0 6) y (-1 -1 -2) de los compuestos $\text{CuFeO}_2$ y $\text{CuFeS}_2$

Identifying low energy adsorption sites for carbon in the  $\text{CuFeO}_2$  (0 0 6) and the  $\text{CuFeS}_2$  (-1 -1 -2) surfaces

Isaac Pantoja Rodríguez<sup>a</sup>, José Trinidad Elizalde Galindo<sup>a\*</sup>

<sup>a</sup>Departamento de Física y Matemáticas, Maestría en Ciencias de los Materiales, Universidad Autónoma de Ciudad Juárez, México. \*Autor de correspondencia. Correo: jose.elizalde@uacj.mx

---

### No. de resumen

2CP21-159

### Formato

Cartel

### Evento

2.º Coloquio de Posgrados del IIT

### Presentador

Isaac Pantoja Rodríguez

### Tema

Ciencia, Ingeniería y Tecnología de los Materiales

### Estatus

Estudio en curso

### Fecha de la presentación

Noviembre 12, 2021

---

### Resumen

En el presente trabajo se obtuvieron mapas de las energías de adsorción para un átomo de carbono en las superficies (0 0 6) y (-1 -1 -2) de los compuestos  $\text{CuFeO}_2$  y  $\text{CuFeS}_2$ , respectivamente, utilizando el software CASTEP, basado en la teoría del funcional de la densidad (DFT). Para ello, estas se modelaron computacionalmente y se reconstruyeron matemáticamente para modelar la morfología de este tipo de superficies en condiciones de laboratorio; posteriormente se definió un mallado con 84 puntos equidistantes paralelos a la superficie del compuesto con una separación normal de 0.5 Å de la misma y se calcularon las energías de adsorción para cada uno de estos puntos del mallado para generar estos mapas. Tras la realización de un análisis basado en la diferencia entre la energía de adsorción de las zonas presentes en la superficie, se propusieron los sitios superficiales más propensos a ser ocupados por carbono al momento de este ser adsorbido en las superficies de estos compuestos. Dicha metodología se planea utilizar para el análisis de los procesos de catálisis heterogénea de  $\text{CO}_2$  en las superficies de estos compuestos anteriormente mencionadas.

**Palabras clave:** adsorción; modelado; superficies; CASTEP; DFT.

### Abstract

In the present work, adsorption energy maps for a carbon atom were obtained for the (0 0 6) and (-1 -1 -2) surfaces of the  $\text{CuFeO}_2$  and  $\text{CuFeS}_2$  compounds respectively using the CASTEP software, based on the Density Functional Theory (DFT). To do so, said surfaces



were computationally modeled and mathematically reconstructed to model the topology of this type of surfaces under laboratory conditions; Subsequently, a matrix was defined with 84 equidistant points parallel to the surface of the compound with a normal separation of 0.5 Å from it, and the adsorption energies for each of these points of the matrix was calculated to generate energy maps. After carrying out an analysis based on the difference between the adsorption energy of the areas present on the surface, adsorption sites most likely to be occupied by carbon at the time of adsorption were proposed. Said methodology is planned to be used for the analysis of heterogeneous CO<sub>2</sub> catalysis processes on the surfaces of these compounds.

**Keywords:** adsorption; modeling; surfaces; CASTEP; DFT.

**Entidad legal responsable del estudio**

Universidad Autónoma de Ciudad Juárez.

**Financiamiento**

Beca del Consejo Nacional de Ciencia y Tecnología / CVU1049738.

**Conflictos de interés**

Los autores declaran que no existe conflicto de intereses.